



**(19) 대한민국특허청(KR)**  
**(12) 공개특허공보(A)**

(11) 공개번호 10-2018-0037881  
 (43) 공개일자 2018년04월13일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
*C09K 11/06* (2006.01) *C07D 403/04* (2006.01)  
*C07D 487/04* (2006.01) *H01L 51/00* (2006.01)  
*H01L 51/50* (2006.01)

(52) CPC특허분류  
*C09K 11/06* (2013.01)  
*C07D 403/04* (2013.01)

(21) 출원번호 10-2017-0098913  
 (22) 출원일자 2017년08월04일  
 심사청구일자 없음

(30) 우선권주장  
 1020160128230 2016년10월05일 대한민국(KR)

(71) 출원인  
**룸엔드하스전자재료코리아유한회사**  
 충청남도 천안시 서북구 3공단1로 56 (백석동)

(72) 발명자  
**이수현**  
 경기도 화성시 석우동 삼성1로 5길 20  
**김치석**  
 경기도 화성시 석우동 삼성1로 5길 20  
 (뒷면에 계속)

(74) 대리인  
**장훈**

전체 청구항 수 : 총 8 항

(54) 발명의 명칭 **유기 전계 발광 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자**

**(57) 요약**

본원은 유기 전계 발광 화합물, 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것으로, 본원에 따른 유기 전계 발광 화합물을 포함함으로써 낮은 구동 전압 및/또는 높은 전력 효율 특성을 갖는 유기 전계 발광 소자를 제공할 수 있다.

(52) CPC특허분류

*C07D 487/04* (2013.01)

*H01L 51/0072* (2013.01)

*H01L 51/5012* (2013.01)

*C09K 2211/1029* (2013.01)

*C09K 2211/1044* (2013.01)

(72) 발명자

**강희룡**

경기도 화성시 석우동 삼성1로 5길 20

**김빛나리**

경기도 화성시 석우동 삼성1로 5길 20

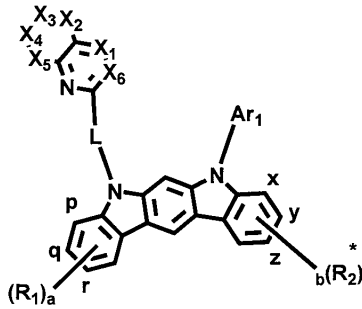
명세서

청구범위

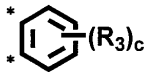
청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물.

[화학식 1]



[화학식 1-a]



상기 화학식 1에서,

x와 y, y와 z, p와 q, q와 r 중 하나 이상은 화학식 1-a의 \* 위치와 융합하고, 이 경우, x와 y, y와 z가 동시에 화학식 1-a의 \* 위치와 융합하는 것은 제외되고, p와 q, q와 r이 동시에 화학식 1-a의 \* 위치와 융합하는 것은 제외되며;

L은 단일 결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴렌이고;

X<sub>1</sub> 내지 X<sub>6</sub>은 각각 독립적으로 N 또는 CR<sub>4</sub>이며, 단, X<sub>1</sub> 내지 X<sub>6</sub> 중 적어도 하나는 N이고;

Ar<sub>1</sub>은 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이고;

R<sub>1</sub> 내지 R<sub>4</sub>는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (3-7원)헤테로시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, -NR<sub>11</sub>R<sub>12</sub>, -SiR<sub>13</sub>R<sub>14</sub>R<sub>15</sub>, -SR<sub>16</sub>, -OR<sub>17</sub>, 시아노, 니트로, 또는 하이드록시이며;

R<sub>11</sub> 내지 R<sub>17</sub>은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (3-7원)헤테로시클로알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이거나; 인접한 치환체와 연결되어 치환 또는 비치환된 (3-30원)의 단일환 또는 다환의 치환족, 방향족, 또는 이들의 조합의 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 치환족, 방향족, 또는 이들의 조합의 고리는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자를 포함할 수 있으며;

a 내지 c는 각각 독립적으로 1 내지 4의 정수이고, a 내지 c가 각각 2 이상의 정수인 경우, 각각의 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub>은 동일하거나 상이할 수 있으며;

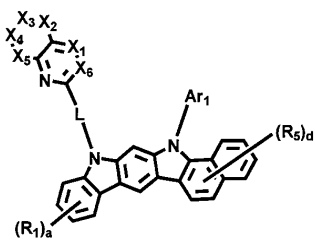
상기 헤테로아릴(렌) 또는 상기 헤테로시클로알킬은 B, N, O, S, Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함한다.

청구항 2

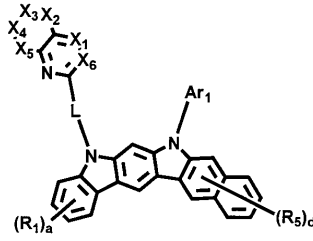
제1항에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 화학식 2 내지 5 중 어느 하나로 표시되는 것인, 유기 전계 발광

화합물.

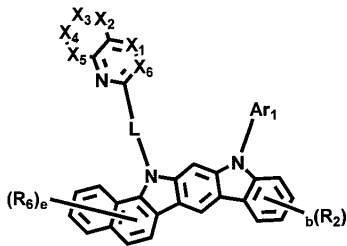
[화학식 2]



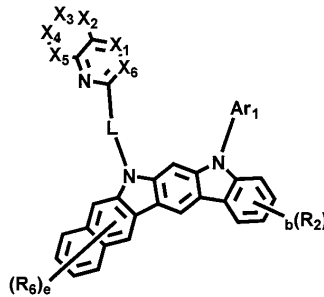
[화학식 3]



[화학식 4]



[화학식 5]



상기 화학식 2 내지 5에서,

L, Ar<sub>1</sub>, R<sub>1</sub>, R<sub>2</sub>, X<sub>1</sub> 내지 X<sub>6</sub>, a 및 b는 제1항에서 정의된 바와 같고,

R<sub>5</sub> 및 R<sub>6</sub>는 각각 독립적으로 R<sub>1</sub> 및 R<sub>2</sub>의 정의와 같고,

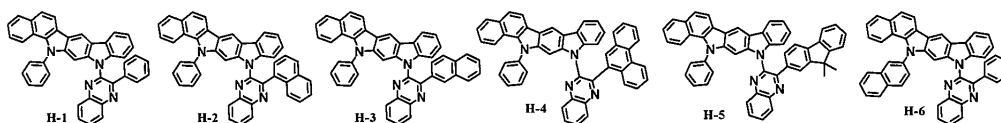
d 및 e는 각각 독립적으로 1 내지 6의 정수이고, d 및 e가 각각 2 이상의 정수인 경우, 각각의 R<sub>5</sub> 및 R<sub>6</sub>은 동일하거나 상이할 수 있다.

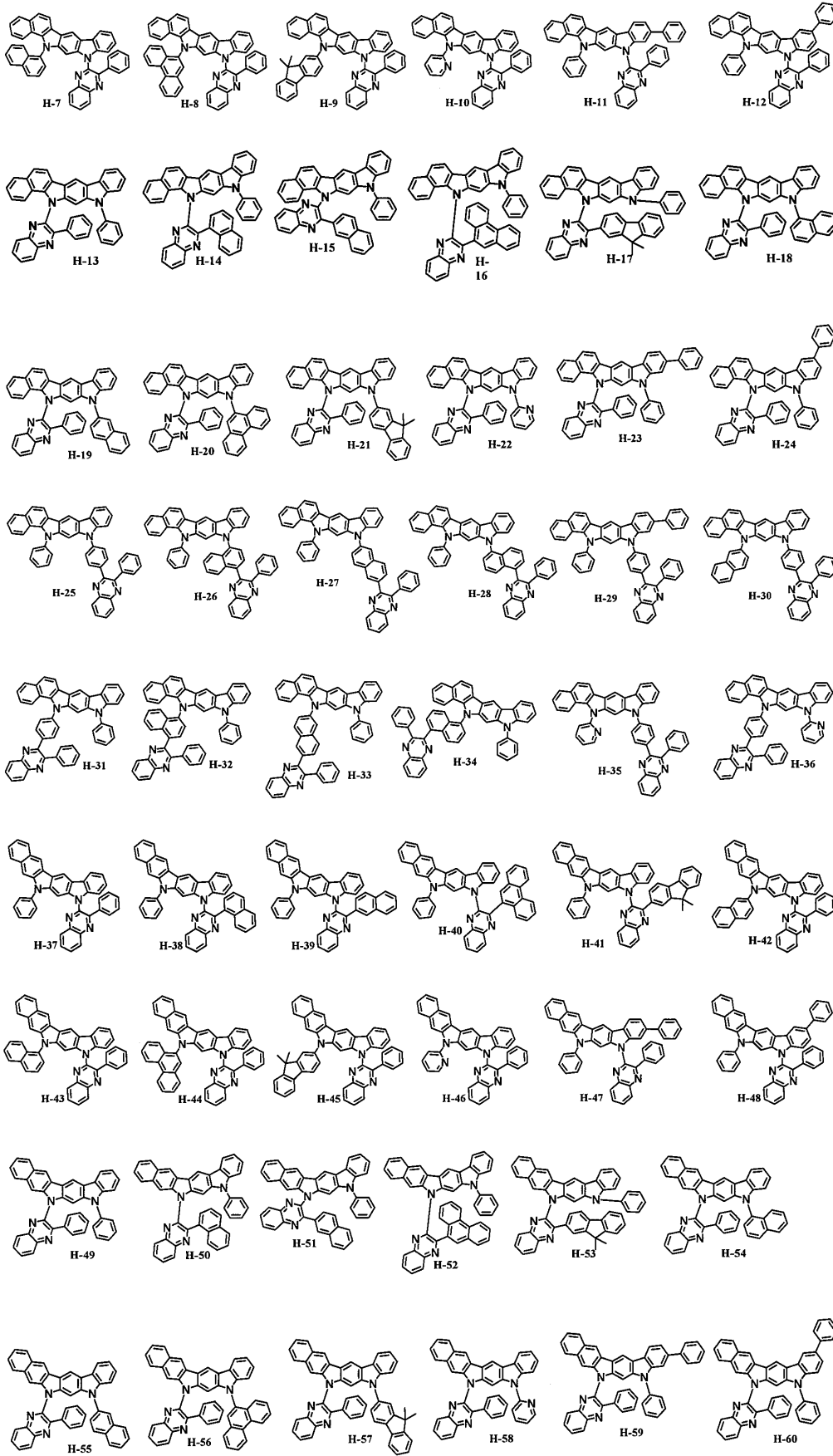
### 청구항 3

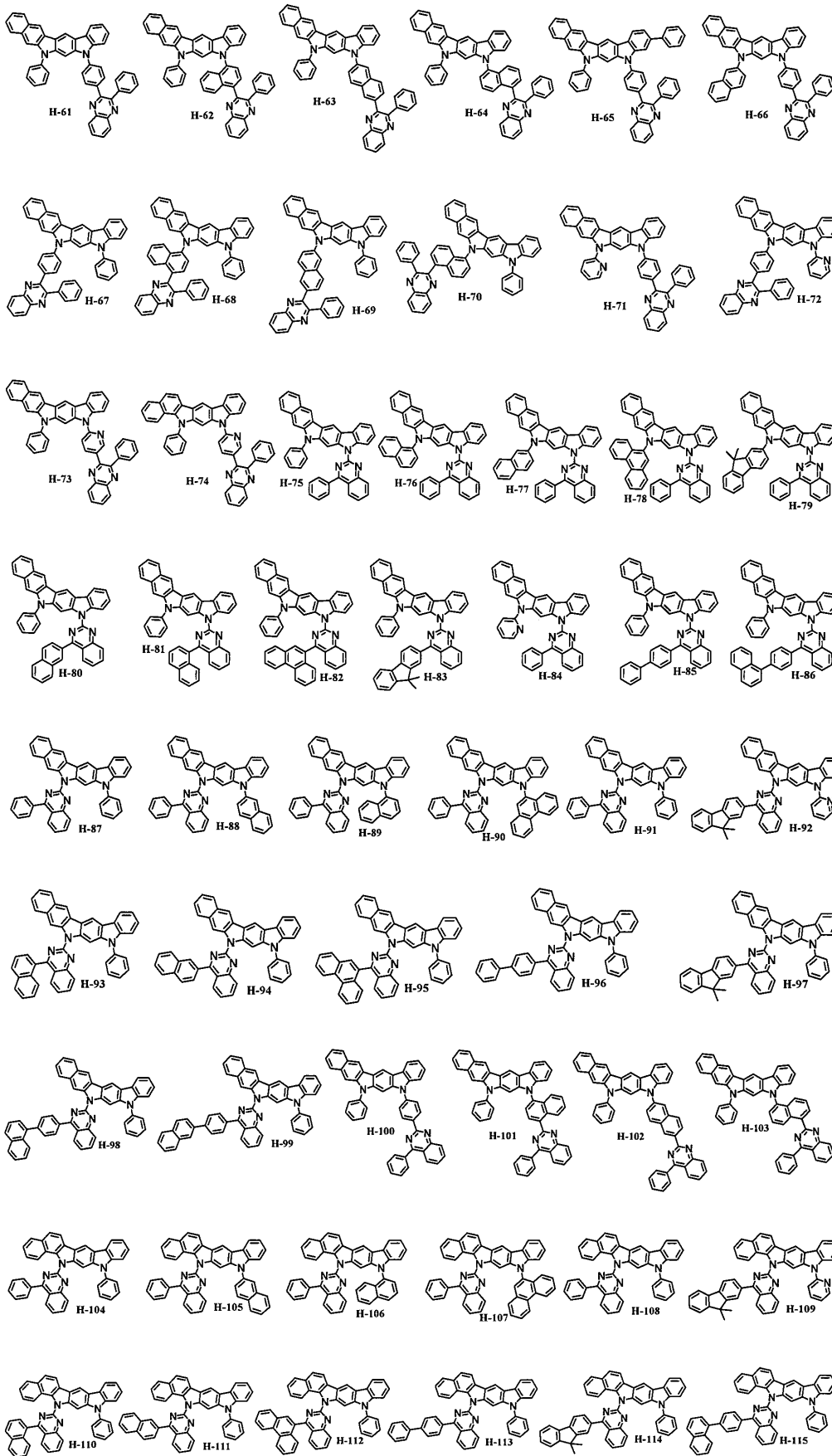
제1항에 있어서, L, Ar<sub>1</sub>, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>4</sub>, 및 R<sub>11</sub> 내지 R<sub>17</sub>에서, 치환된 알킬, 치환된 아릴(렌), 치환된 헤테로아릴(렌), 치환된 시클로알킬, 치환된 헤테로시클로알킬, 치환된 아르알킬, 및 치환된 단일환 또는 다환의 치환족, 방향족, 또는 이들의 조합의 고리의 치환체는 각각 독립적으로 중수소; 할로젠; 시아노; 카르복실; 니트로; 히드록시; (C1-C30)알킬; 할로(C1-C30)알킬; (C2-C30)알케닐; (C2-C30)알키닐; (C1-C30)알콕시; (C1-C30)알킬티오; (C3-C30)시클로알킬; (C3-C30)시클로알케닐; (3-7원)헤테로시클로알킬; (C6-C30)아릴옥시; (C6-C30)아릴티오; (C6-C30)아릴; (5-30원)헤테로아릴; 트리(C1-C30)알킬실릴; 트리(C6-C30)아릴실릴; 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴; (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴; 아미노; 모노- 또는 디- (C1-C30)알킬아미노; 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노; (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노; (C1-C30)알킬카보닐; (C1-C30)알콕시카보닐; (C6-C30)아릴카보닐; 디(C6-C30)아릴보로닐; 디(C1-C30)알킬보로닐; (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴보로닐; (C6-C30)아르(C1-C30)알킬; 및 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상인, 유기 전계 발광 화합물.

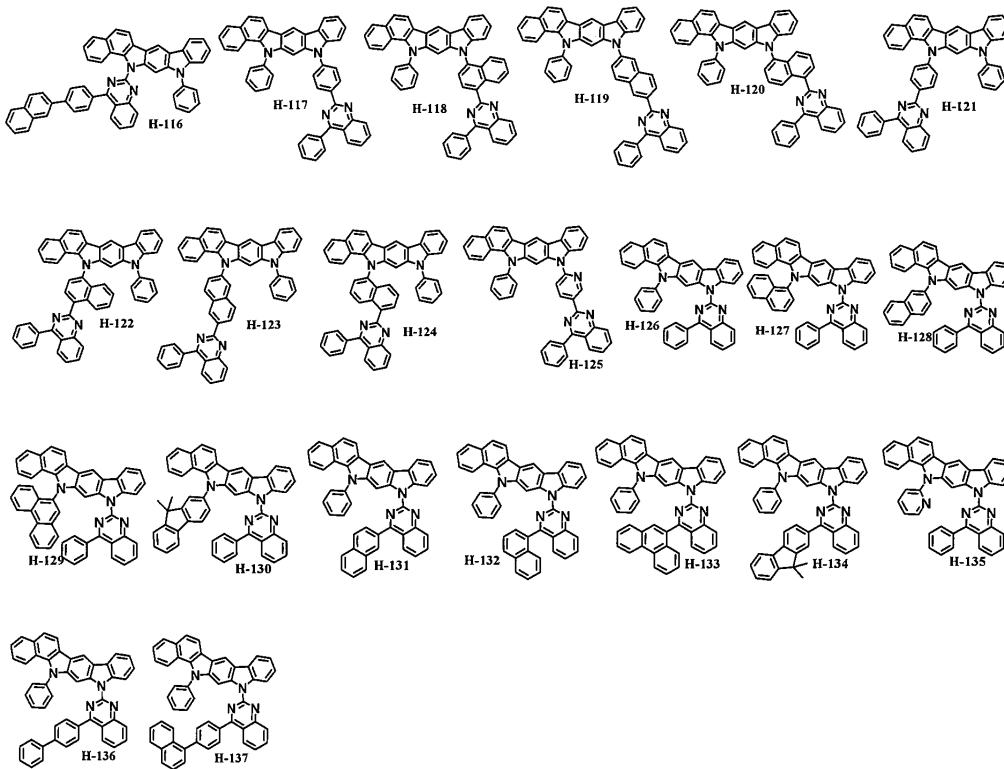
### 청구항 4

제1항에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 화합물로부터 선택되는 하나 이상인, 유기 전계 발광 화합물.









**청구항 5**

제1항에 기재된 유기 전계 발광 화합물을 포함하는, 유기 전계 발광 재료.

**청구항 6**

제1항에 기재된 유기 전계 발광 화합물을 포함하는, 유기 전계 발광 소자.

**청구항 7**

제6항에 있어서, 상기 유기 전계 발광 화합물을 호스트로서 포함하는, 유기 전계 발광 소자.

**청구항 8**

제1항에 기재된 유기 전계 발광 화합물을 포함하는, 디스플레이 장치.

**발명의 설명**

**기술 분야**

[0001] 본 발명은 유기 전계 발광 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

**배경 기술**

[0002] 전계 발광 소자(electroluminescent device; EL 소자)는 자체 발광형 표시 소자로서 시야각이 넓고 콘트라스트가 우수할 뿐만 아니라 응답속도가 빠르다는 장점을 가지고 있다. 1987년 이스트만 코닥(Eastman Kodak)사는 발광층 형성용 재료로서 저분자인 방향족 디아민과 알루미늄 착물을 이용하고 있는 유기 EL 소자를 처음으로 개발하였다[참조: Appl. Phys. Lett. 51, 913, 1987].

[0003] 유기 전계 발광 소자(organic electroluminescent device; OLED)는 유기 발광 재료에 전기를 가해 전기 에너지를 빛으로 바꾸는 소자로서, 통상 양극(애노드), 음극(캐소드), 및 이들 사이에 유기물층을 포함하는 구조를 가진다. 유기 전계 발광 소자의 유기물층은 필요에 따라, 정공 주입층, 정공 전달층, 정공 보조층, 발광 보조층, 전자 차단층, 발광층(호스트 및 도판트 재료 포함), 전자 버퍼층, 정공 차단층, 전자 전달층, 전자 주입층 등을

포함할 수 있다. 상기 유기물층에 사용되는 재료는 기능에 따라 정공 주입 재료, 정공 전달 재료, 정공 보조 재료, 발광 보조 재료, 전자 차단 재료, 발광 재료, 전자 버퍼 재료, 정공 차단 재료, 전자 전달 재료, 전자 주입 재료 등으로 나뉠 수 있다. 이러한 유기 전계 발광 소자에서는 전압 인가에 의해 양극에서 정공이, 음극에서 전자가 발광층에 주입되고, 정공과 전자의 재결합에 의해 에너지가 높은 엑시톤이 형성된다. 이 에너지에 의해 유기 발광 화합물이 여기 상태로 되며, 유기 발광 화합물의 여기 상태가 기저 상태로 돌아가면서 에너지를 빛으로 방출하여 발광하게 된다.

[0004] 유기 전계 발광 소자의 발광 재료는 소자의 발광 효율을 결정하는 가장 중요한 요인으로서, 발광 재료는 양자 효율이 높고 전자와 정공의 이동도가 커야 하고, 형성된 발광 재료층은 균일하고 안정해야 한다. 이러한 발광 재료는 발광색에 따라 청색, 녹색 또는 적색 발광 재료로 나뉘고, 추가로 황색 또는 주황색 발광 재료도 있다. 또한, 발광 재료는 기능적인 측면에서 호스트 재료와 도판트 재료로 구분될 수 있다. 최근에 고효율 및 장수명의 유기 전계 발광 소자의 개발이 시급한 과제로 대두되고 있는데, 특히 중대형 OLED 패널에서 요구하고 있는 EL 특성 수준을 고려해 볼 때 기존의 발광 재료에 비해 매우 우수한 재료의 개발이 시급한 실정이다.

[0005] 기존의 재료들은 발광 특성 측면에서는 유리한 면이 있으나, 다음과 같은 단점이 있다: (1) 유리 전이 온도가 낮고 열적 안정성이 낮아서, 진공 하에서 고온 증착 공정시 열화되며, 소자의 수명이 저하된다. (2) 유기 전계 발광 소자에서 전력 효율 =  $[(\pi/\text{전압}) \times \text{전류 효율}]$ 의 관계에 있으므로 전력 효율은 전압에 반비례하는데, 인광용 호스트 재료를 사용한 유기 전계 발광 소자는 형광 재료를 사용한 유기 전계 발광 소자에 비해 전류 효율(cd/A)은 높으나, 구동 전압 역시 상당히 높기 때문에 전력 효율(lm/w) 면에서 큰 이점이 없다. (3) 또한, 유기 전계 발광 소자에 사용할 경우, 작동 수명 측면에서도 만족스럽지 못하며, 발광 효율도 여전히 개선이 요구된다. 따라서, 유기 EL 소자의 우수한 특성을 구현하기 위해서는 소자 내 유기물층을 구성하는 재료들, 특히 발광 재료를 구성하는 호스트 또는 도판트를 적절히 선택해야 한다.

[0006] 한편, 유기 전계 발광 소자의 전압 특성을 개선하기 위해서, 인돌로카바졸 유도체는 호스트 HOMO 성분으로 종종 사용되었다. 그러나, 구동 전압을 더 낮추기 위해서, 기존의 인돌로카바졸을 개선할 필요성이 있다.

[0007] 한국 등록특허공보 제1313730호는 유기 전계 발광 화합물로서 인돌로카바졸 화합물을 개시하고 있으나, 벤조-인돌로카바졸 구조에 대해서는 구체적으로 개시하고 있지 않다.

[0008] 한국 공개특허공보 제2015-77513호는 유기 전계 발광 화합물로서 HOMO 관점에서 [c]벤조-인돌로카바졸 구조를 개시하고 있으나, [a]벤조-인돌로카바졸 및 [b]벤조-인돌로카바졸 구조에 대해서는 구체적으로 개시하고 있지 않다.

## 선행기술문헌

### 특허문헌

- [0009] (특허문헌 0001) 한국 등록특허공보 제1313730호 (2013. 10. 1. 발행)  
 (특허문헌 0002) 한국 공개특허공보 제2015-77513호 (2015. 7. 8. 발행)

## 발명의 내용

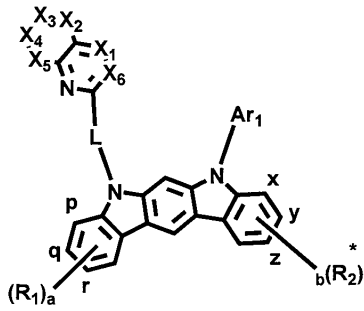
### 해결하려는 과제

- [0010] 본원의 목적은 낮은 구동 전압 및/또는 높은 전력 효율 특성을 갖는 유기 전계 발광 소자를 제조하는데 효과적인 유기 전계 발광 화합물을 제공하는 것이다.

### 과제의 해결 수단

- [0011] 상기의 기술적 과제를 해결하기 위해 예의 연구한 결과, 본 발명자들은 벤조-인돌로카바졸 유도체, 특히 [a]벤조-인돌로카바졸 또는 [b]벤조-인돌로카바졸의 유도체를 포함하면 유기 전계 발광 소자가 낮은 구동 전압 및/또는 개선된 전력 효율을 달성할 수 있음을 발견하여 본 발명을 완성하였다. 구체적인 예로, 하기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물이 상술한 목적을 달성할 수 있다.

[0012] [화학식 1]



[0013]

[0014] [화학식 1-a]



[0015]

[0016] 상기 화학식 1에서,

[0017] x와 y, y와 z, p와 q, q와 r 중 하나 이상은 화학식 1-a의 \* 위치와 융합하고, 이 경우, x와 y, y와 z가 동시에 화학식 1-a의 \* 위치와 융합하는 것은 제외되고, p와 q, q와 r이 동시에 화학식 1-a의 \* 위치와 융합하는 것은 제외되며;

[0018] L은 단일 결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아틸렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아틸렌이고;

[0019] X<sub>1</sub> 내지 X<sub>6</sub>은 각각 독립적으로 N 또는 CR<sub>i</sub>이며, 단, X<sub>1</sub> 내지 X<sub>6</sub> 중 적어도 하나는 N이고;

[0020] Ar<sub>1</sub>은 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아틸, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아틸이고;

[0021] R<sub>1</sub> 내지 R<sub>17</sub>는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아틸, 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아틸, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (3-7원)헤테로시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, -NR<sub>11</sub>R<sub>12</sub>, -SiR<sub>13</sub>R<sub>14</sub>R<sub>15</sub>, -SR<sub>16</sub>, -OR<sub>17</sub>, 시아노, 니트로, 또는 하이드록시이며;

[0022] R<sub>11</sub> 내지 R<sub>17</sub>은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아틸, 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아틸, 치환 또는 비치환된 (3-7원)헤테로시클로알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이거나; 인접한 치환체와 연결되어 치환 또는 비치환된 (3-30원)의 단일환 또는 다환의 지환족, 방향족, 또는 이들의 조합의 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 지환족, 방향족, 또는 이들의 조합의 고리는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자를 포함할 수 있으며;

[0023] a 내지 c는 각각 독립적으로 1 내지 4의 정수이고, a 내지 c가 각각 2 이상의 정수인 경우, 각각의 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub>은 동일하거나 상이할 수 있으며;

[0024] 상기 헤테로아틸(렌) 또는 상기 헤테로시클로알킬은 B, N, O, S, Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함한다.

**발명의 효과**

[0025] 본원에 따른 유기 전계 발광 화합물을 포함함으로써, 낮은 구동 전압 및/또는 높은 전력 효율 특성을 갖는 유기 전계 발광 소자를 제공할 수 있다.

**발명을 실시하기 위한 구체적인 내용**

[0026] 이하에서 본원을 더욱 상세히 설명하나, 이는 설명을 위한 것으로 본원의 범위를 제한하도록 해석되어서는 안 된다.

[0027] 본원에서 "유기 전계 발광 화합물"은 유기 전계 발광 소자에 사용될 수 있는 화합물을 의미하며, 필요에 따라

유기 전계 발광 소자를 구성하는 임의의 층에 포함될 수 있다.

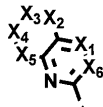
[0028] 본원에서 "유기 전계 발광 재료"는 유기 전계 발광 소자에 사용될 수 있는 재료를 의미하고, 1종 이상의 화합물을 포함할 수 있으며, 필요에 따라 유기 전계 발광 소자를 구성하는 임의의 층에 포함될 수 있다. 예를 들면, 상기 유기 전계 발광 재료는 정공 주입 재료, 정공 전달 재료, 정공 보조 재료, 발광 보조 재료, 전자 차단 재료, 발광 재료, 전자 버퍼 재료, 정공 차단 재료, 전자 전달 재료, 전자 주입 재료일 수 있다.

[0029] 본원의 유기 전계 발광 재료는 상기 화학식 1로 표시되는 1종 이상의 화합물을 포함할 수 있다. 이에 한정되는 것은 아니지만, 상기 화학식 1의 화합물은 발광층에 포함될 수 있으며, 이 경우 화학식 1의 화합물은 호스트로 포함될 수 있다.

[0030] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물에 대해 보다 구체적으로 설명하면 다음과 같다.

[0031] 상기 화학식 1에서, x와 y, y와 z, p와 q, q와 r 중 하나 이상은 화학식 1-a의 \*위치와 융합하고, 이 경우, x와 y, y와 z가 동시에 화학식 1-a의 \* 위치와 융합하는 것은 제외되고, p와 q, q와 r이 동시에 화학식 1-a의 \* 위치와 융합하는 것은 제외된다. 화학식 1의 x와 y가 화학식 1-a의 \* 위치와 융합하는 것은, 화학식 1의 x 및 y 위치와 화학식 1-a의 두 개의 \* 위치에서, 화학식 1의 x와 y를 포함하는 벤젠 고리와 화학식 1-a의 벤젠 고리가 서로 융합하여 나프탈렌 고리를 형성하는 것을 의미한다. 본원의 일 양태에 따르면, 화학식 1의 x와 y, 또는 y와 z의 위치 및/또는 p와 q, 또는 q와 r의 위치와 화학식 1-a의 \*위치에서 화학식 1과 화학식 1-a가 서로 융합하여 하나 이상의 고리를 형성할 수 있으며; 본원의 다른 일 양태에 따르면, 화학식 1의 x와 y, y와 z, p와 q, 또는 q와 r의 위치와 화학식 1-a의 \* 위치에서 화학식 1과 화학식 1-a가 서로 융합하여 하나의 고리를 형성할 수 있다.

[0032] 상기 화학식 1에서, L은 단일 결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헥테로아릴렌이고; 본원의 일 양태에 따르면, 단일 결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C25)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-25원)헥테로아릴렌일 수 있고; 본원의 다른 일 양태에 따르면, 단일 결합, 비치환된 (C6-C18)아릴렌, 또는 비치환된 (5-18원)헥테로아릴렌일 수 있고; 예를 들면, L은 단일 결합, 비치환된 페닐렌, 비치환된 나프틸렌, 또는 비치환된 피리디닐렌일 수 있다.



[0033] 상기 화학식 1에서, \* 은 치환 또는 비치환된 퀴놀살리닐, 치환 또는 비치환된 쿠나졸리닐, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐, 치환 또는 비치환된 피리도피리미디닐, 또는 치환 또는 비치환된 피리도피라진일일 수 있고; 본원의 일 양태에 따르면, 치환 또는 비치환된 퀴놀살리닐, 또는 치환 또는 비치환된 쿠나졸리닐일 수 있으며; 본원의 다른 일 양태에 따르면 치환 또는 비치환된 퀴놀살리닐일 수 있다.

[0034] 상기 화학식 1에서, Ar<sub>1</sub>은 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헥테로아릴이고; 본원의 일 양태에 따르면, 치환 또는 비치환된 (C6-C25)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-25원)헥테로아릴일 수 있고; 본원의 다른 일 양태에 따르면, (C1-C6)알킬로 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴, 또는 비치환된 (5-18원)헥테로아릴일 수 있고; 예를 들면, 비치환된 페닐, 비치환된 나프틸, 디메틸로 치환된 플루오레닐, 비치환된 페난트레닐, 또는 비치환된 피리딜일 수 있다.

[0035] 상기 화학식 1에서, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>4</sub>는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원)헥테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (3-7원)헥테로시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, -NR<sub>11</sub>R<sub>12</sub>, -SiR<sub>13</sub>R<sub>14</sub>R<sub>15</sub>, -SR<sub>16</sub>, -OR<sub>17</sub>, 시아노, 니트로, 또는 하이드록시이고, 본원의 일 양태에 따르면, 각각 독립적으로 수소, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C25)아릴일 수 있고, 본원의 다른 일 양태에 따르면, 각각 독립적으로 수소, 또는 (C1-C6)알킬로 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴일 수 있다. 본원의 다른 일 양태에 따르면, R<sub>1</sub>은 수소, 또는 비치환된 (C6-C18)아릴일 수 있고, R<sub>2</sub> 및 R<sub>3</sub>은 수소일 수 있으며, R<sub>4</sub>는 수소, 비치환된 (C6-C18)아릴, 또는 비치환된 (C1-C4)알킬(C6-C18)아릴일 수 있다. 예를 들면, R<sub>1</sub>은 수소, 또는 비치환된 페닐일 수 있고, R<sub>2</sub> 및 R<sub>3</sub>은 수소일 수 있으며, R<sub>4</sub>는 수소, 비치환된 페닐, 비치환된 나프틸, 비치환된 비페닐, 비치

환된 나프틸페닐, 비치환된 디메틸플루오레닐, 또는 비치환된 페난트레닐일 수 있다. 또한,  $X_1$  또는  $X_6$ 이  $CR_4$ 인 경우,  $R_4$ 는 (C1-C6)알킬로 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴일 수 있고,  $X_2$  내지  $X_5$ 가  $CR_4$ 인 경우,  $R_4$ 는 수소일 수 있다. 상기  $R_{11}$  내지  $R_{17}$ 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (3-7원)헤테로시클로알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이거나; 인접한 치환체와 연결되어 치환 또는 비치환된 (3-30원)의 단일환 또는 다환의 치환족, 방향족, 또는 이들의 조합의 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 치환족, 방향족, 또는 이들의 조합의 고리는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자를 포함할 수 있다.

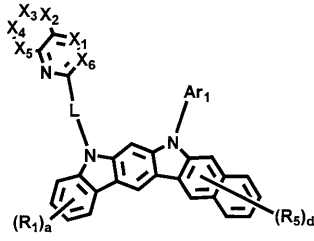
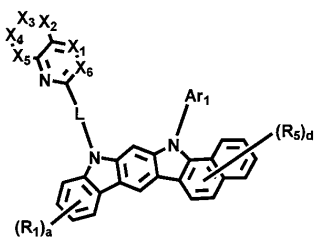
[0036] 상기 화학식 1에서, a 내지 c는 각각 독립적으로 1 내지 4의 정수이고, a 내지 c가 각각 2 이상의 정수인 경우, 각각의  $R_1$  내지  $R_3$ 은 동일하거나 상이할 수 있으며; 본원의 일 양태에 따르면, 각각 독립적으로 1 또는 2의 정수이고; 본원의 다른 일 양태에 따르면, 각각 독립적으로 1의 정수이다.

[0037] 상기 화학식 1에서, 상기 헤테로아릴(렌) 또는 상기 헤테로시클로알킬은 B, N, O, S, Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하고; 본원의 일 양태에 따르면, N, O 및 S로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하고; 본원의 다른 일 양태에 따르면, 하나 이상의 질소 원자를 포함한다.

[0038] 상기 화학식 1은 하기 화학식 2 내지 5 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

[0039] [화학식 2]

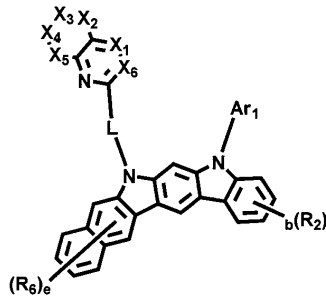
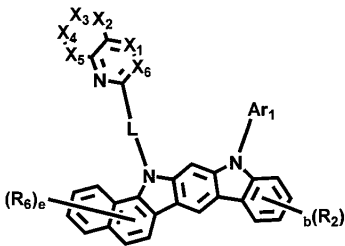
[화학식 3]



[0040]

[0041] [화학식 4]

[화학식 5]



[0042]

[0043] 상기 화학식 2 내지 5에서, L,  $Ar_1$ ,  $R_1$ ,  $R_2$ ,  $X_1$  내지  $X_6$ , a 및 b는 화학식 1에서 정의된 바와 같다.

[0044] 상기 화학식 2 내지 5에서,  $R_5$  및  $R_6$ 는 각각 독립적으로  $R_1$  및  $R_2$ 의 정의와 같다.

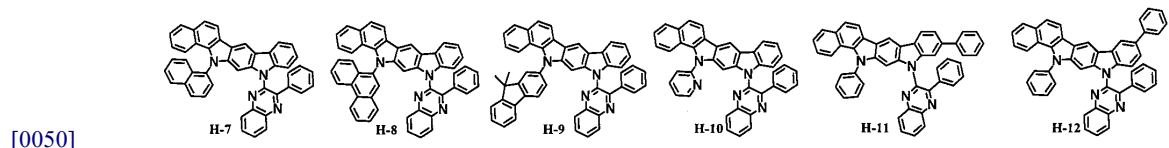
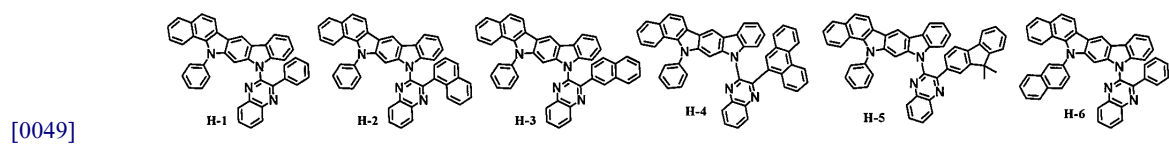
[0045] 상기 화학식 2 내지 5에서, d 및 e는 각각 독립적으로 1 내지 6의 정수이고, d 및 e가 각각 2 이상의 정수인 경우, 각각의  $R_5$  및  $R_6$ 은 동일하거나 상이할 수 있으며; 본원의 일 양태에 따르면, 각각 독립적으로 1 또는 2의 정수이고, 본원의 다른 일 양태에 따르면, 각각 독립적으로 1의 정수이다.

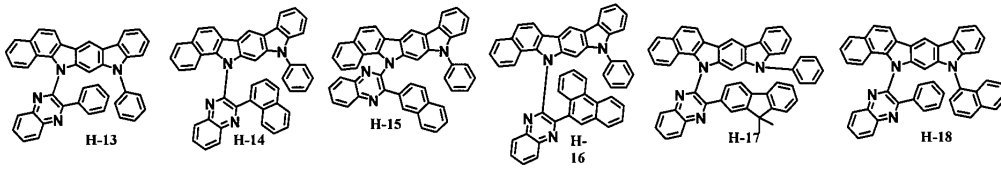
[0046] 본원에서 "(C1-C30)알킬"은 쇠를 구성하는 탄소수가 1 내지 30개인 직쇄 또는 분지쇄 알킬을 의미하고, 여기에서 탄소수는 바람직하게는 1 내지 20개, 더 바람직하게는 1 내지 10개이다. 상기 알킬의 구체적인 예로서, 메틸, 에틸, n-프로필, 이소프로필, n-부틸, 이소부틸 및 tert-부틸 등이 있다. 본원에서 "(C3-C30)시클로알킬"은 환 골격 탄소수가 3 내지 30개인 단일환 또는 다환 탄화수소를 의미하고, 상기 탄소수는 바람직하게는 3 내지 20개, 더 바람직하게는 3 내지 7개이다. 상기 시클로알킬의 예로서, 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 시클로헥실 등이 있다. 본원에서 "(3-7원) 헤테로시클로알킬"은 환 골격 원자수가 3 내지 7개, 바람직하게

는 5 내지 7개이고, B, N, O, S, Si 및 P로 이루어진 군, 바람직하게는 O, S 및 N로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 시클로알킬을 의미하고, 예를 들어, 테트라히드로푸란, 피롤리딘, 티올란, 테트라히드로피란 등이 있다. 본원에서 "(C6-C30)아릴(렌)"은 환 골격 탄소수가 6 내지 30개인 방향족 탄화수소에서 유래된 단일환 또는 융합환계 라디칼을 의미하고, 부분적으로 포화될 수도 있다. 상기 환 골격 탄소수는 바람직하게는 6 내지 25개, 더 바람직하게는 6 내지 18개이다. 상기 아릴(렌)은 스피로 구조를 가진 것을 포함한다. 상기 아릴의 예로서 페닐, 비페닐, 터페닐, 나프틸, 비나프틸, 페닐나프틸, 나프틸페닐, 플루오레닐, 페닐플루오레닐, 벤조플루오레닐, 디벤조플루오레닐, 페난트레닐, 페닐페난트레닐, 안트라세닐, 인데닐, 트리페닐레닐, 피레닐, 테트라세닐, 페릴레닐, 크라이세닐, 나프타세닐, 플루오란테닐, 스피로비플루오레닐 등이 있다. 본원에서 "(5-30원) 헤테로아릴(렌)"은 환 골격 원자수가 5 내지 30개이고, B, N, O, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 아릴기를 의미한다. 헤테로원자수는 바람직하게는 1 내지 4개이고, 단일 환계이거나 하나 이상의 벤젠환과 축합된 융합환계일 수 있으며, 부분적으로 포화될 수도 있다. 또한, 본원에서 상기 헤테로아릴(렌)은 하나 이상의 헤테로아릴 또는 아릴기가 단일 결합에 의해 헤테로아릴기와 연결된 형태도 포함하며, 스피로 구조를 가진 것도 포함한다. 상기 헤테로아릴의 예로서, 푸릴, 티오펜일, 피롤릴, 이미다졸릴, 피라졸릴, 티아졸릴, 티아디아졸릴, 이소티아졸릴, 이속사졸릴, 옥사졸릴, 옥사디아졸릴, 트리아진일, 테트라진일, 트리아졸릴, 테트라졸릴, 푸라잔일, 피리딜, 피라진일, 피리미딘일, 피리다진일 등의 단일 환계 헤테로아릴, 벤조푸란일, 벤조티오펜일, 이소벤조푸란일, 디벤조푸란일, 디벤조티오펜일, 벤조이미다졸릴, 벤조티아졸릴, 벤조이소티아졸릴, 벤조이속사졸릴, 벤조옥사졸릴, 이소인돌릴, 인돌릴, 벤조인돌릴, 인다졸릴, 벤조티아디아졸릴, 퀴놀릴, 이소퀴놀릴, 신놀리닐, 퀴나졸리닐, 퀴녹살리닐, 나프티리디닐, 카바졸릴, 벤조카바졸릴, 디벤조카바졸릴, 페녹사진일, 페노티아진일, 페난트리딘일, 벤조디옥솔릴, 디하이드로아크리디닐 등의 융합 환계 헤테로아릴 등이 있다. 본원에서 "할로젠"은 F, Cl, Br 및 I 원자를 포함한다.

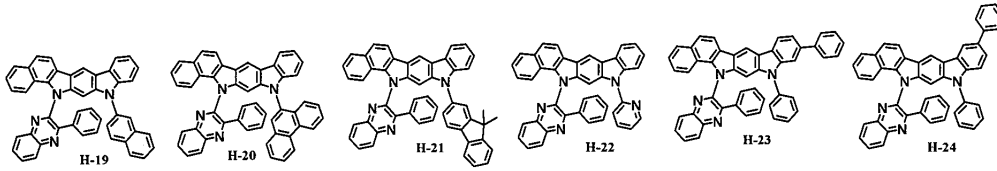
[0047] 또한, 본원에 기재되어 있는 "치환 또는 비치환"이라는 기재에서 "치환"은 어떤 작용기에서 수소 원자가 다른 원자 또는 다른 작용기 (즉, 치환체)로 대체되는 것을 뜻한다. 화학식 1 및 1-a의 L, Ar<sub>1</sub>, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>4</sub>, 및 R<sub>11</sub> 내지 R<sub>17</sub>에서, 치환된 알킬, 치환된 아릴(렌), 치환된 헤테로아릴(렌), 치환된 시클로알킬, 치환된 헤테로시클로알킬, 치환된 아르알킬, 및 치환된 단일환 또는 다환의 치환족, 방향족, 또는 이들의 조합의 고리의 치환체는 각각 독립적으로 중수소; 할로젠; 시아노; 카르복실; 니트로; 히드록시; (C1-C30)알킬; 할로(C1-C30)알킬; (C2-C30)알케닐; (C2-C30)알키닐; (C1-C30)알콕시; (C1-C30)알킬티오; (C3-C30)시클로알킬; (C3-C30)시클로알케닐; (3-7원)헤테로시클로알킬; (C6-C30)아릴옥시; (C6-C30)아릴티오; (C6-C30)아릴; (5-30원)헤테로아릴; 트리(C1-C30)알킬실릴; 트리(C6-C30)아릴실릴; 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴; (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴; 아미노; 모노- 또는 디- (C1-C30)알킬아미노; 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노; (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노; (C1-C30)알킬카보닐; (C1-C30)알콕시카보닐; (C6-C30)아릴카보닐; 디(C6-C30)아릴보로닐; 디(C1-C30)알킬보로닐; (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴보로닐; (C6-C30)아르(C1-C30)알킬; 및 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상이며, 본원의 일 양태에 따르면, 각각 독립적으로 (C1-C20)알킬; (C6-C25)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-25원)헤테로아릴; (C6-C25)아릴; 및 (C1-C20)알킬(C6-C25)아릴로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상이며, 본원의 다른 일 양태에 따르면, 각각 독립적으로 (C1-C10)알킬 및 (C6-C18)아릴로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상이며, 예를 들면, 메틸 및 나프틸로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상일 수 있다.

[0048] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 구체적으로 하기의 화합물로서 예시될 수 있으나, 이들에 한정되는 것은 아니다.

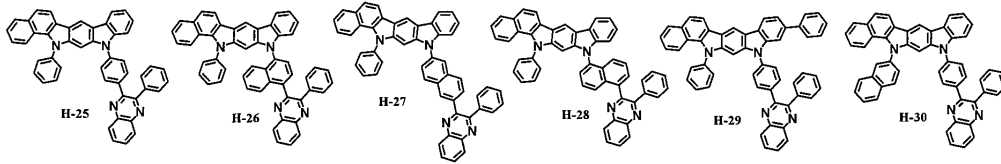




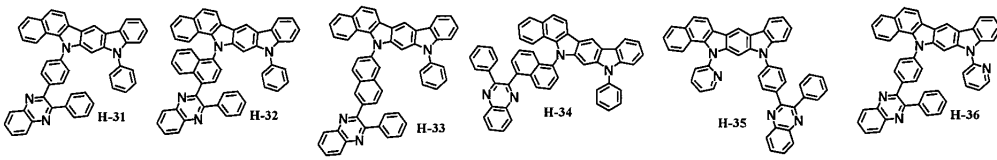
[0051]



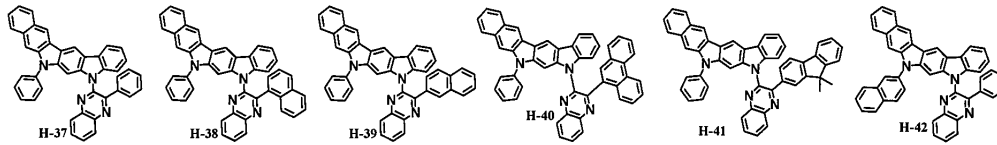
[0052]



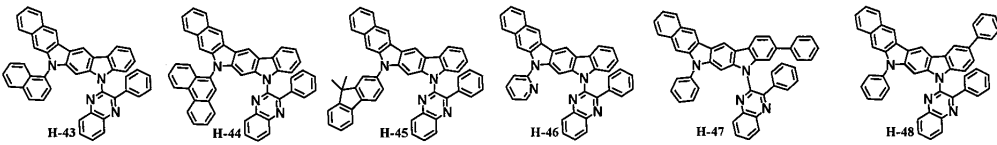
[0053]



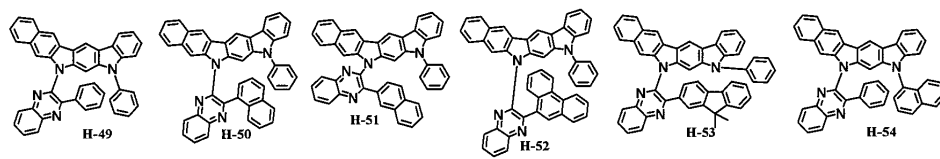
[0054]



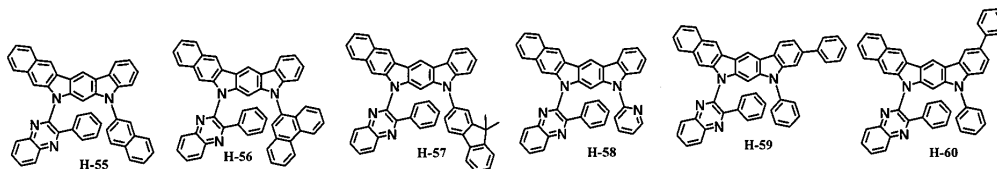
[0055]



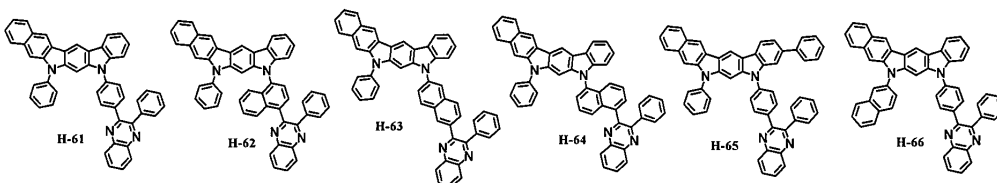
[0056]



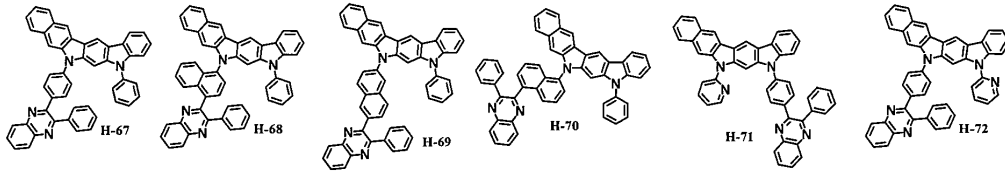
[0057]



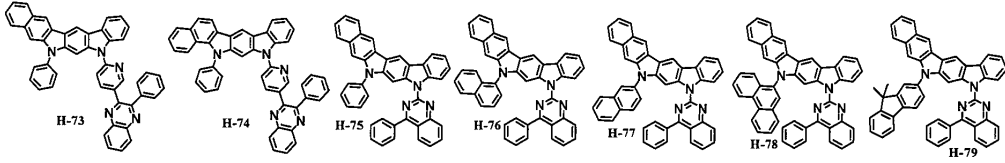
[0058]



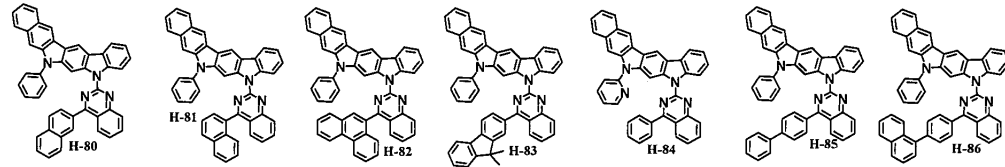
[0059]



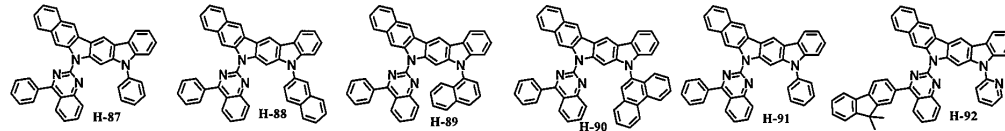
[0060]



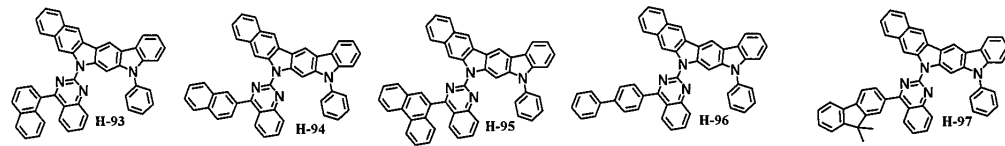
[0061]



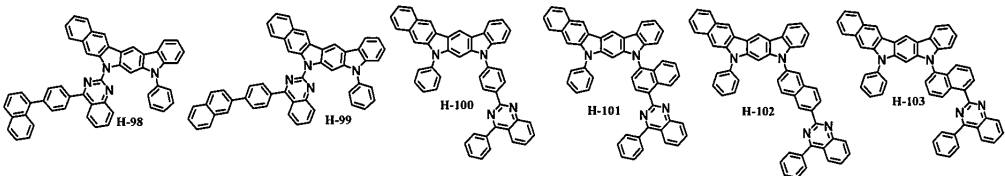
[0062]



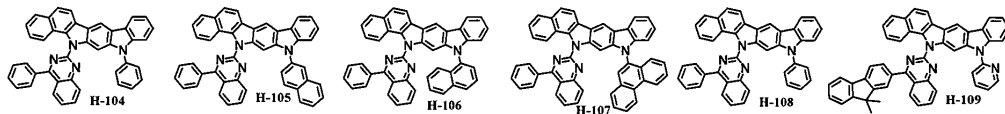
[0063]



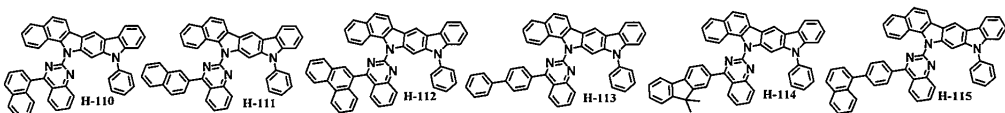
[0064]



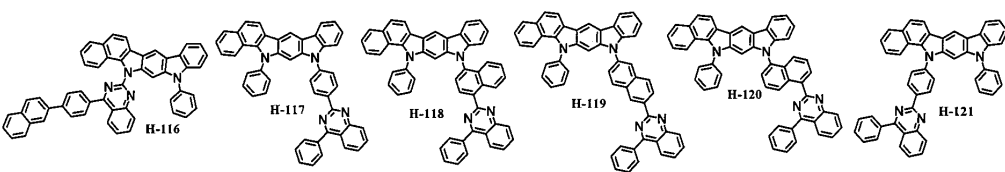
[0065]



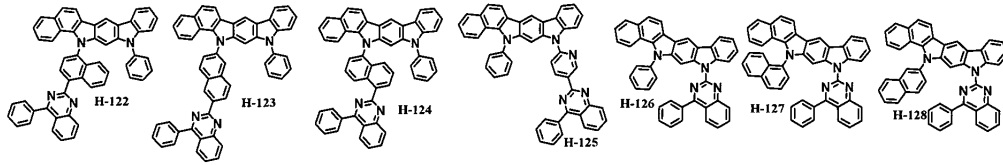
[0066]



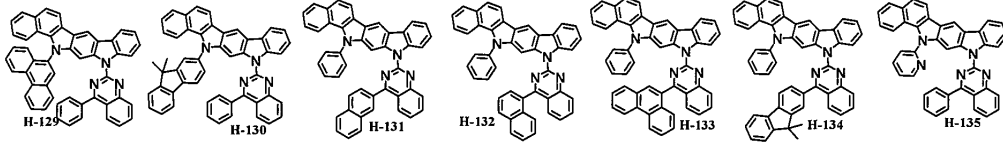
[0067]



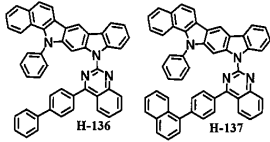
[0068]



[0069]



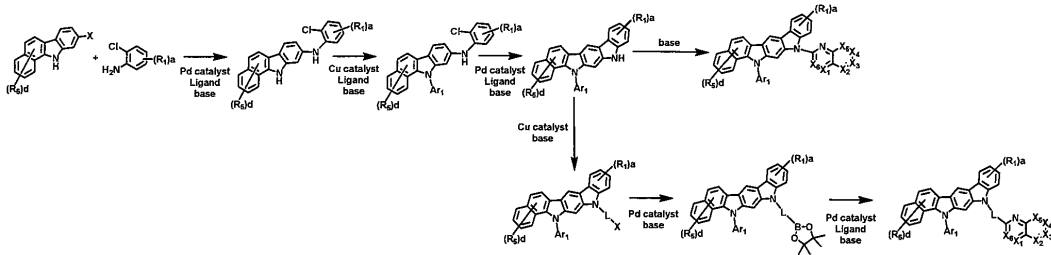
[0070]



[0071]

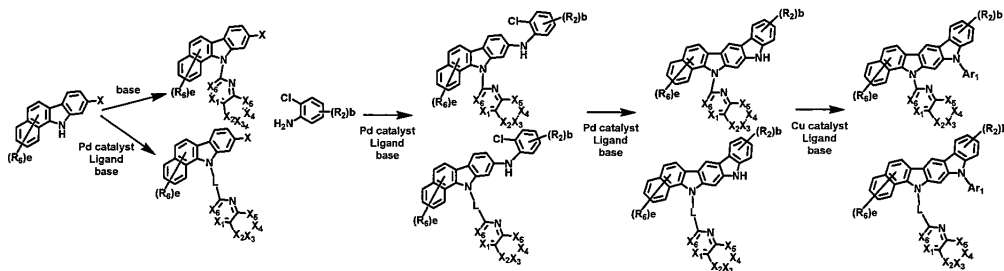
[0072] 본원에 따른 화학식 1의 화합물은 당업자에게 공지된 합성 방법으로 제조할 수 있으며, 예를 들면 하기 반응식 1 내지 5에 나타난 바와 같이 제조할 수 있다.

[0073] [반응식 1]



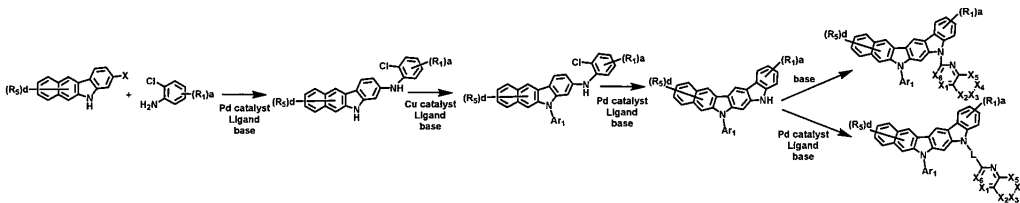
[0074]

[0075] [반응식 2]



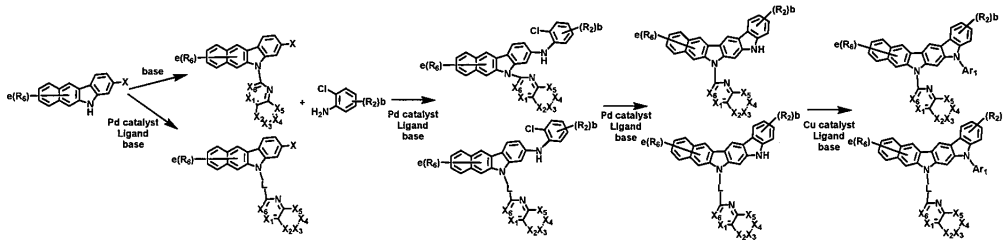
[0076]

[0077] [반응식 3]



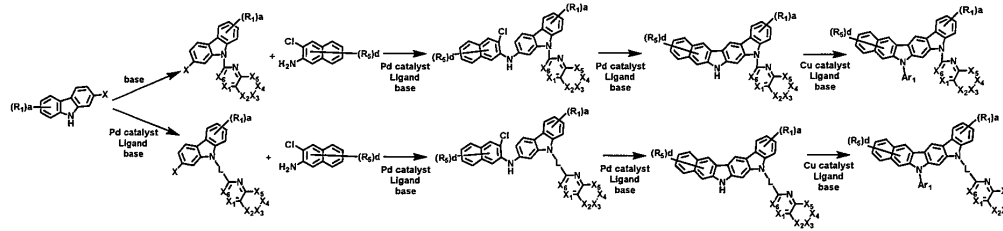
[0078]

[0079] [반응식 4]



[0080]

[0081] [반응식 5]



[0082]

[0083] 상기 반응식 1 내지 5에서 L, Ar<sub>1</sub>, R<sub>1</sub>, R<sub>2</sub>, R<sub>5</sub>, R<sub>6</sub>, X<sub>1</sub> 내지 X<sub>6</sub>, a, b, d 및 e는 상기 화학식 1 내지 5에서의 정의와 동일하고, X는 할로젠이다.

[0084] 본원은 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 재료, 및 상기 재료를 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공할 수 있다.

[0085] 상기 재료는 본원의 유기 전계 발광 화합물 단독으로 이루어질 수 있고, 유기 전계 발광 재료에 포함되는 통상의 물질들을 추가로 포함할 수도 있다.

[0086] 본원에 따른 유기 전계 발광 소자는 제1 전극; 제2 전극; 및 상기 제1 전극 및 제2 전극 사이에 개재되는 1층 이상의 유기물층을 갖고, 상기 유기물층은 상기 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물을 하나 이상 포함할 수 있다.

[0087] 상기 제1 전극과 제2 전극 중 하나는 애노드이고, 다른 하나는 캐소드일 수 있다. 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 정공 주입층, 정공 전달층, 정공 보조층, 발광 보조층, 전자 전달층, 전자 버퍼층, 전자 주입층, 계면층(interlayer), 정공 차단층 및 전자 차단층에서 선택되는 1층 이상을 더 포함할 수 있다.

[0088] 여기서, 상기 정공 보조층 또는 상기 발광 보조층은 정공 전달층과 발광층 사이에 위치할 수 있고, 이들은 정공의 전달 속도를 조절할 수 있는 층이다. 상기 정공 보조층 또는 상기 발광 보조층은 유기 전계 발광 소자의 효율 및/또는 수명의 개선 효과를 가질 수 있다.

[0089] 본원의 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물은 상기 발광층에 포함될 수 있다. 발광층에 사용될 경우, 본원의 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물은 호스트 재료로서 포함될 수 있다. 바람직하게는, 상기 발광층은 하나 이상의 도판트를 추가로 더 포함할 수 있으며, 필요한 경우, 본원의 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물 이외의 다른 화합물을 제2 호스트 재료로 추가로 포함할 수 있다. 이 때, 제1 호스트 재료와 제 2 호스트 재료의 중량비는 1:99 내지 99:1 범위이다.

[0090] 상기 제2 호스트 재료는 공지된 인광 호스트라면 어느 것이든 사용 가능하나, 하기 화학식 11 내지 화학식 16으로 표시되는 화합물로 구성된 군으로부터 선택되는 것이 발광 효율 면에서 특히 바람직하다.

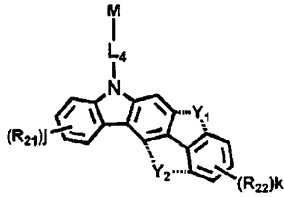
[0091] [화학식 11]

[0092] H-(Cz-L<sub>4</sub>)<sub>n</sub>-M

[0093] [화학식 12]

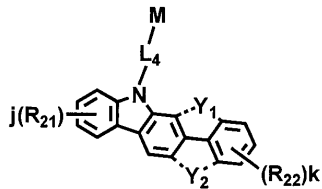
[0094] H-(Cz)<sub>i</sub>-L<sub>4</sub>-M

[0095] [화학식 13]



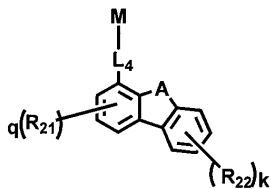
[0096]

[0097] [화학식 14]



[0098]

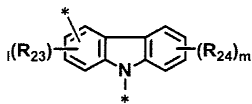
[0099] [화학식 15]



[0100]

[0101] 상기 화학식 11 내지 15에서,

[0102] Cz는 하기 구조이며,

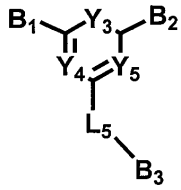


[0103]

[0104] A는 -O- 또는 -S-이고;

[0105] R<sub>21</sub> 내지 R<sub>24</sub>는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴 또는 -SiR<sub>25</sub>R<sub>26</sub>R<sub>27</sub>이며, R<sub>25</sub> 내지 R<sub>27</sub>은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이고; L<sub>4</sub>는 단일 결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아틸렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아틸렌이고; M은 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이며; Y<sub>1</sub> 및 Y<sub>2</sub>는 각각 독립적으로 -O-, -S-, -N(R<sub>31</sub>)-, 또는 -C(R<sub>32</sub>)(R<sub>33</sub>)- 이고, Y<sub>1</sub>과 Y<sub>2</sub>가 동시에 존재하지는 않으며; R<sub>31</sub> 내지 R<sub>33</sub>은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이고, R<sub>32</sub> 및 R<sub>33</sub>은 동일하거나 상이할 수 있으며; h 및 i는 각각 독립적으로 1 내지 3의 정수이고, j, k, l 및 m은 각각 독립적으로 1 내지 4의 정수이며, q는 1 내지 3의 정수이고, h, i, j, k, l, m 또는 q가 2 이상의 정수인 경우 각각의 (Cz-L<sub>4</sub>), 각각의 (Cz), 각각의 R<sub>21</sub>, 각각의 R<sub>22</sub>, 각각의 R<sub>23</sub> 또는 각각의 R<sub>24</sub>는 동일하거나 상이할 수 있다.

[0106] [화학식 16]



[0107]

[0108] 상기 화학식 16에서,

[0109]  $Y_3$  내지  $Y_5$ 는 각각 독립적으로  $CR_{34}$  또는 N이고

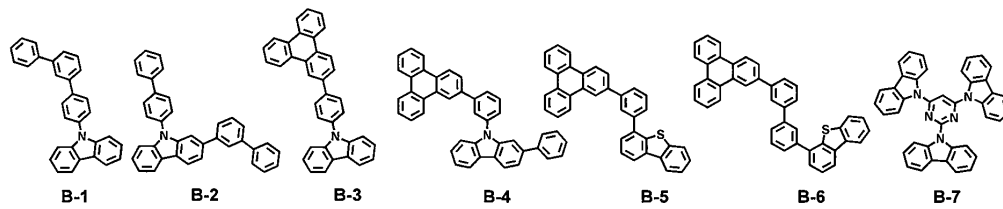
[0110]  $R_{34}$ 는 수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이고;

[0111]  $B_1$  및  $B_2$ 는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이고;

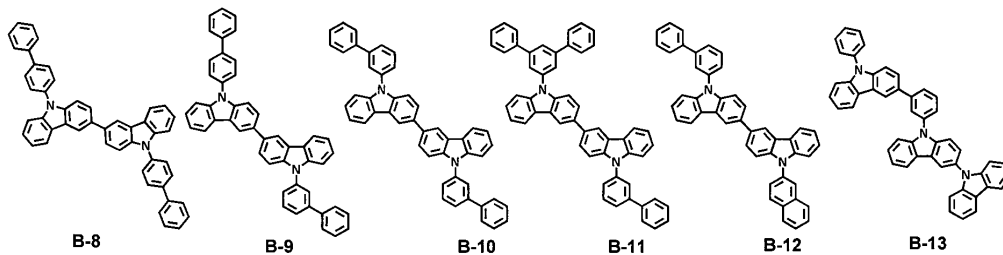
[0112]  $B_3$ 은 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이고;

[0113]  $L_5$ 는 단일 결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴렌이다.

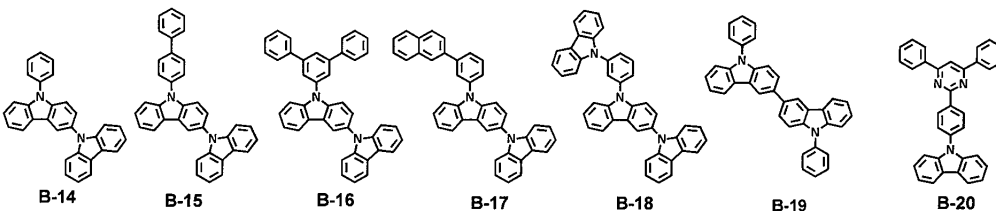
[0114] 구체적으로 상기 제2 호스트 재료의 바람직한 예는 다음과 같으나, 이에 한정되지는 않는다.



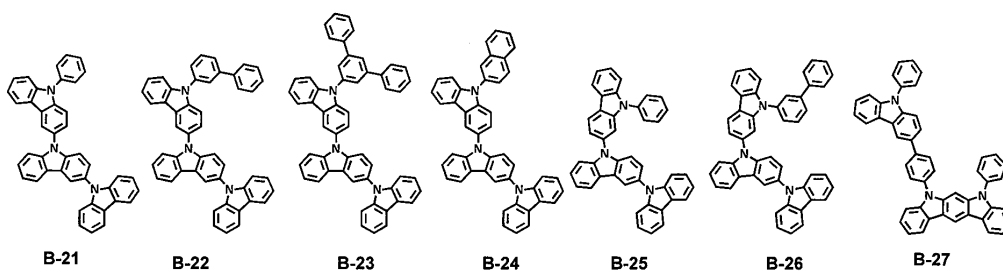
[0115]



[0116]

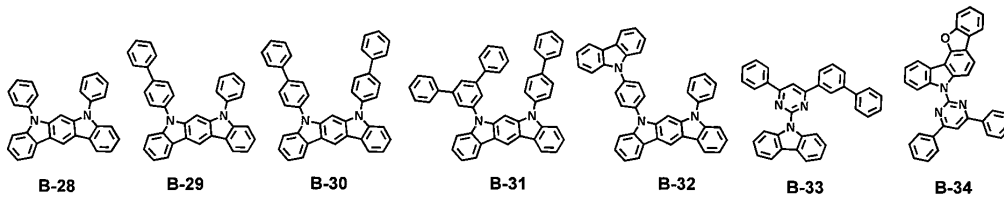


[0117]

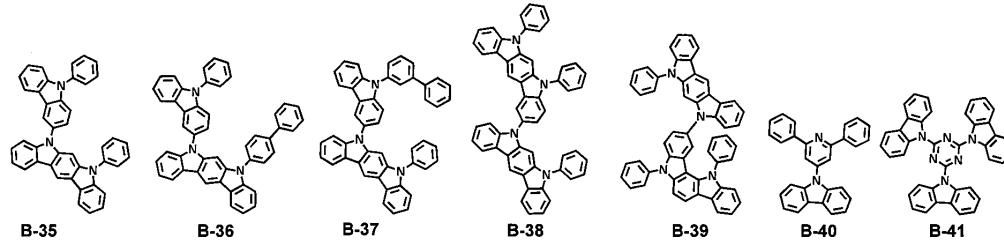


[0118]

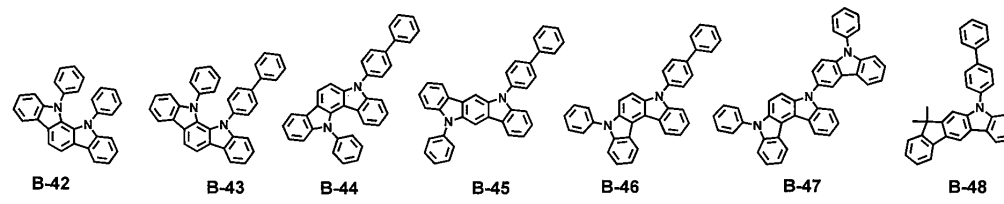
[0119]



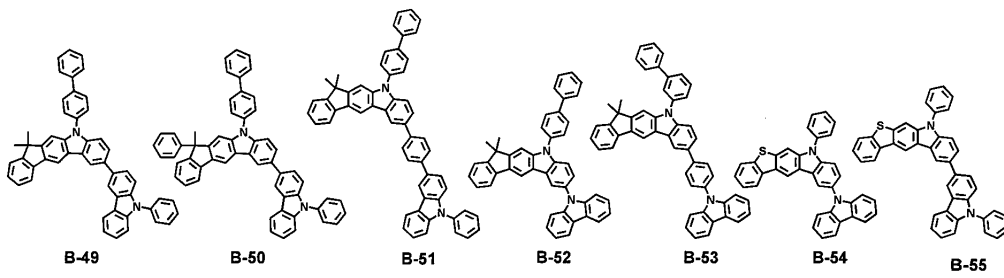
[0120]



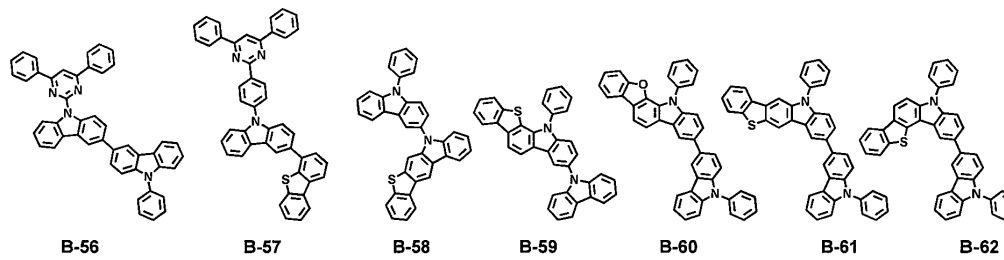
[0121]



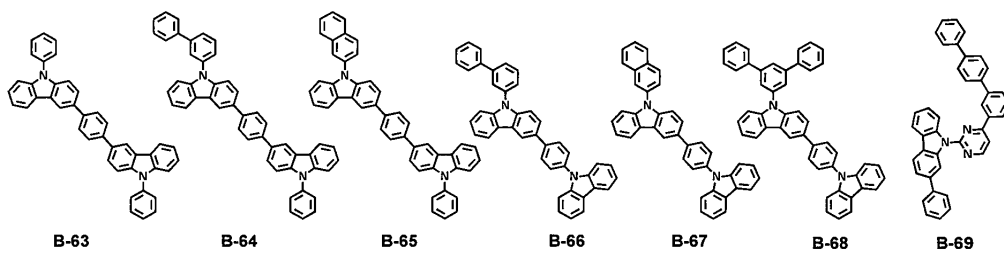
[0122]



[0123]

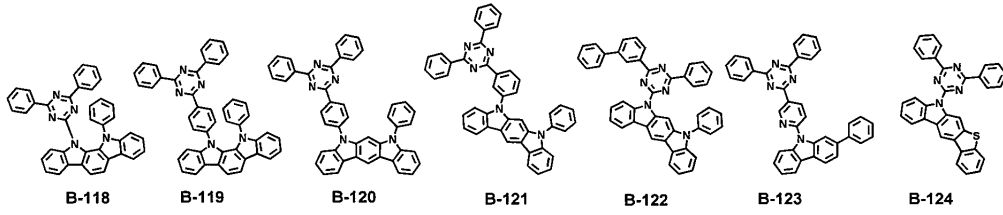


[0124]

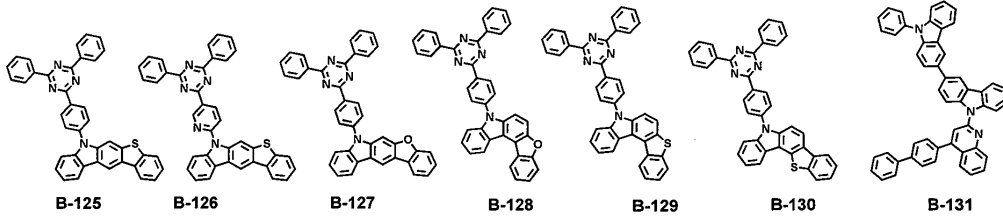




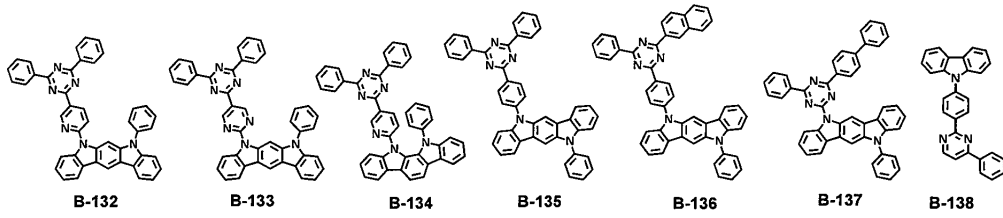
[0132]



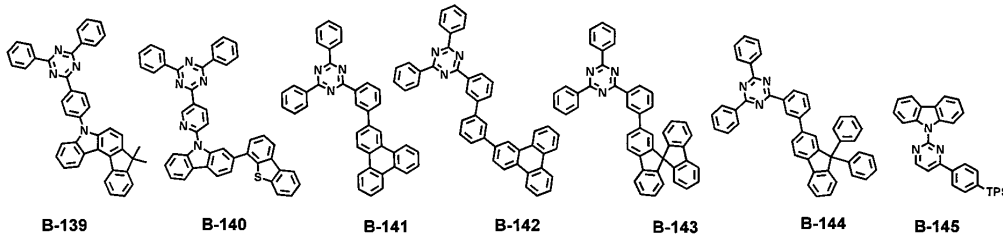
[0133]



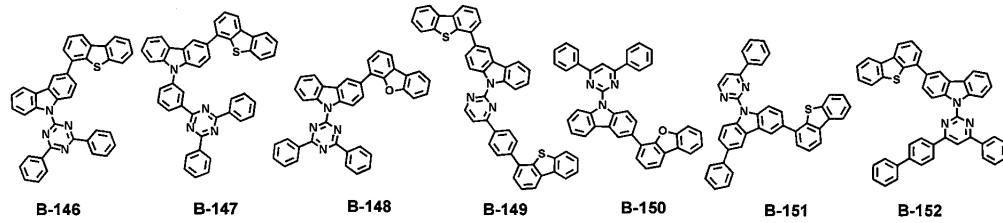
[0134]



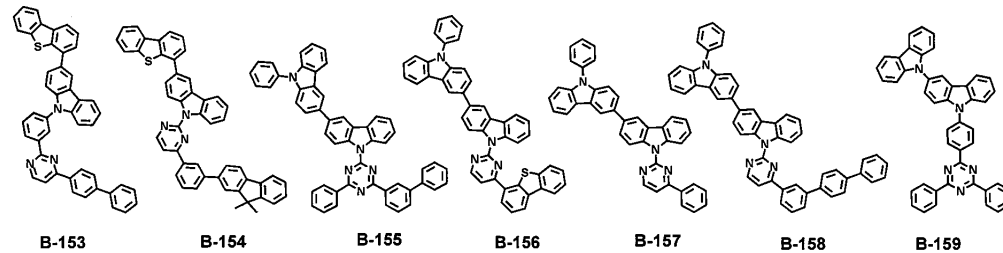
[0135]



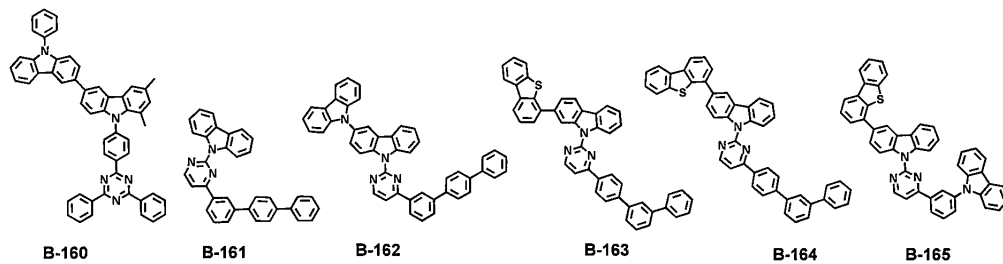
[0136]



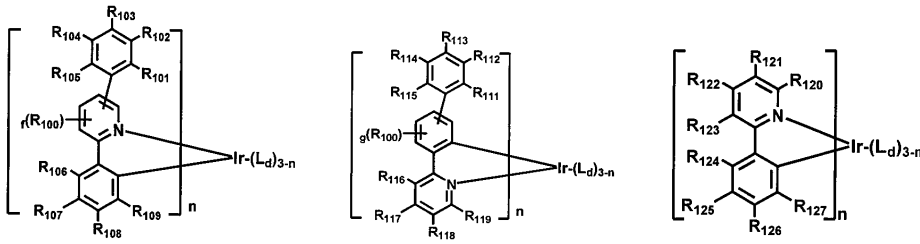
[0137]



[0138]



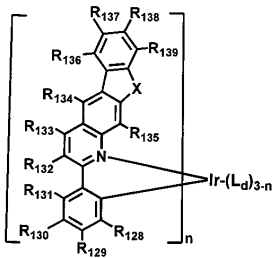




[0148]

[0149]

[화학식 104]



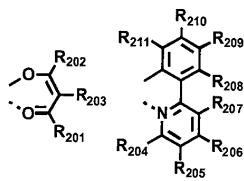
[0150]

[0151]

상기 화학식 101 내지 104에서,

[0152]

$L_d$ 는 하기 구조에서 선택되고;



[0153]

[0154]

$R_{100}$ ,  $R_{134}$  및  $R_{135}$ 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이며;

[0155]

$R_{101}$  내지  $R_{109}$ , 및  $R_{111}$  내지  $R_{123}$ 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 중수소 또는 할로젠으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 시아노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시이고;  $R_{106}$  내지  $R_{109}$ 는 인접 치환기가 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 융합 고리를 형성할 수 있는데, 예를 들어 알킬로 치환 또는 비치환된 플루오렌, 알킬로 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜, 또는 알킬로 치환 또는 비치환된 디벤조푸란 형성이 가능하며;  $R_{120}$  내지  $R_{123}$ 은 인접 치환기가 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 융합 고리를 형성할 수 있는데, 예를 들어 알킬, 아릴, 아르알킬 및 알킬아릴 중 하나 이상으로 치환 또는 비치환된 퀴놀린 형성이 가능하며;

[0156]

$R_{124}$  내지  $R_{133}$ , 및  $R_{136}$  내지  $R_{139}$ 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이고;  $R_{124}$  내지  $R_{127}$ 은 인접 치환기가 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 융합 고리를 형성할 수 있는데, 예를 들어 알킬로 치환 또는 비치환된 플루오렌, 알킬로 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜, 또는 알킬로 치환 또는 비치환된 디벤조푸란 형성이 가능하며;

[0157]

X는  $CR_{21}R_{22}$ , O 또는 S이고;

[0158]

$R_{21}$  및  $R_{22}$ 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C10)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이며;

[0159]

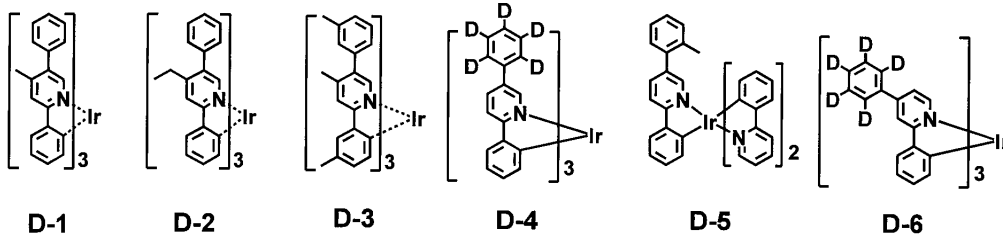
$R_{201}$  내지  $R_{211}$ 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 중수소 또는 할로젠으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 또는 알킬 또는 중수소로 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이고,  $R_{208}$  내지  $R_{211}$ 은 인접 치환기가 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 융합 고리를 형성할 수 있는데, 예를 들어 알킬로 치환 또는 비치환된 플루오렌, 알킬로 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜, 또는 알킬로 치환 또는

비치환된 디벤조푸란 형성이 가능하며;

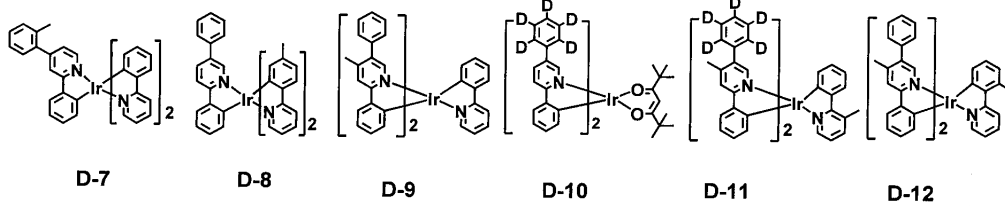
[0160] f 및 g는 각각 독립적으로 1 내지 3의 정수이며; f 또는 g가 각각 2 이상의 정수인 경우 각각의 R<sub>100</sub>은 서로 동일하거나 상이할 수 있고;

[0161] s는 1 내지 3의 정수이다.

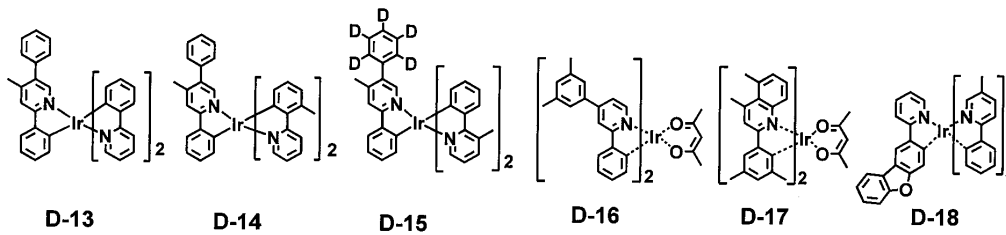
[0162] 구체적으로, 상기 도판트 화합물의 구체적인 예는 다음과 같으나, 이에 한정되지는 않는다.



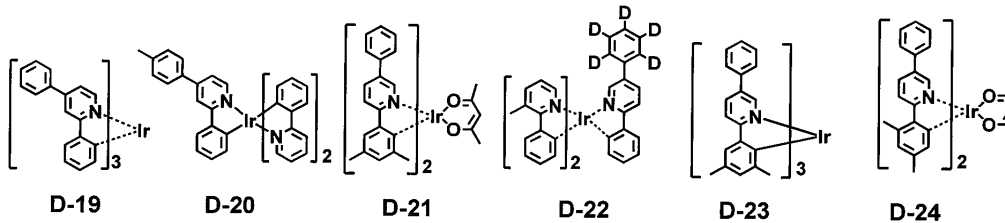
[0163]



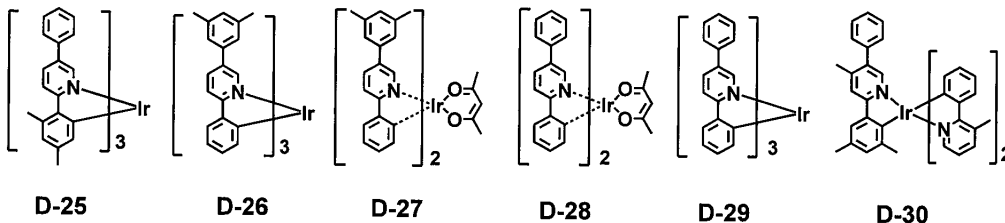
[0164]



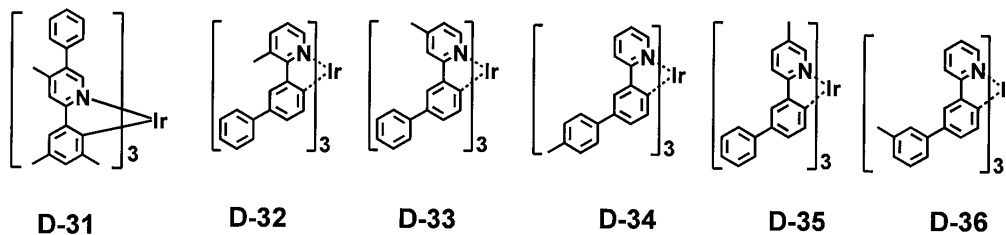
[0165]



[0166]

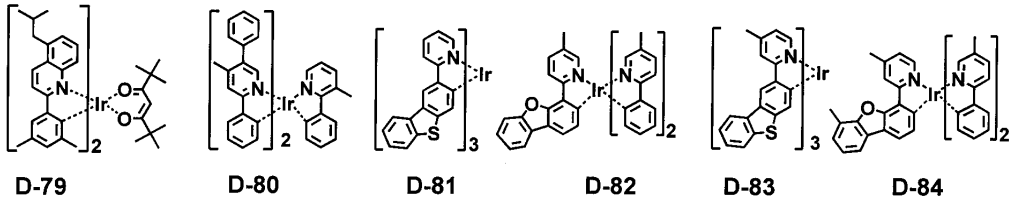


[0167]

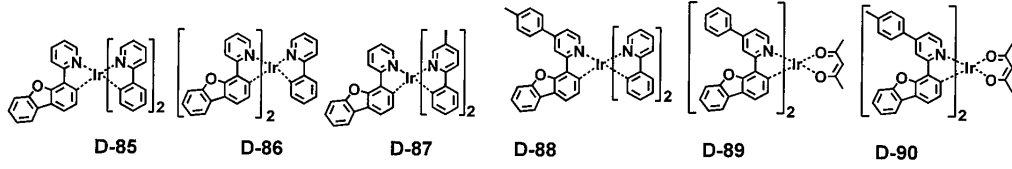


[0168]

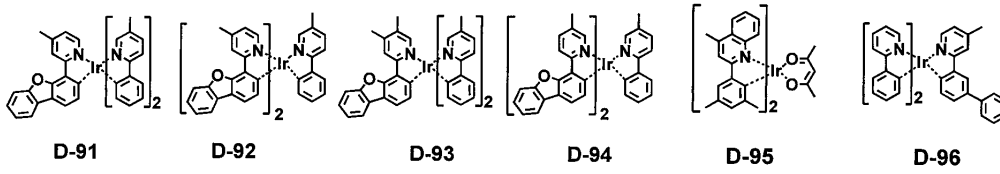




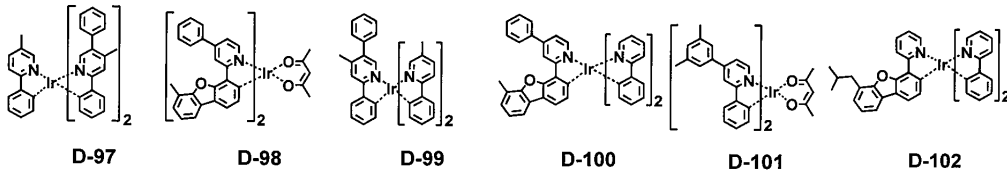
[0176]



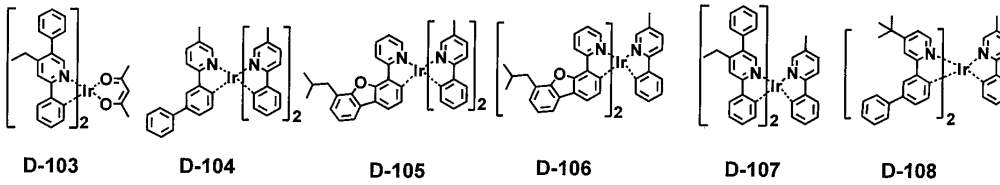
[0177]



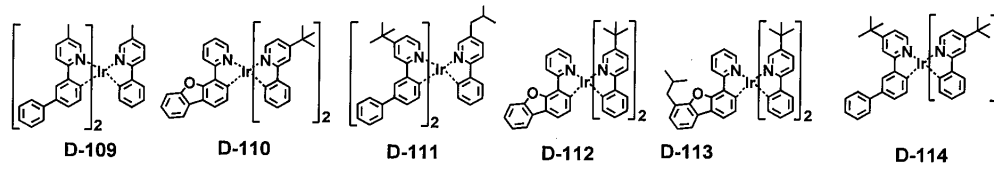
[0178]



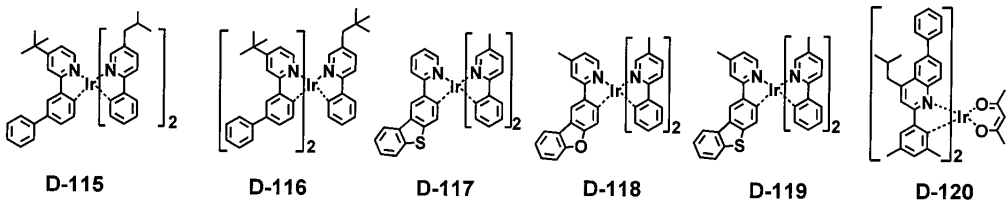
[0179]



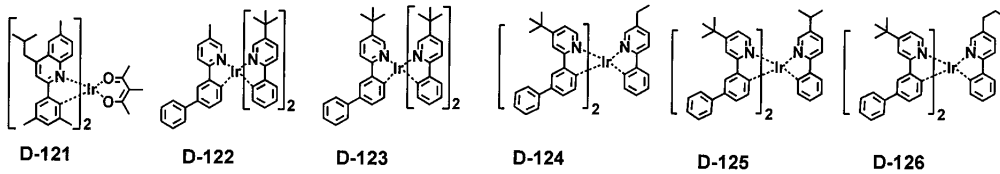
[0180]



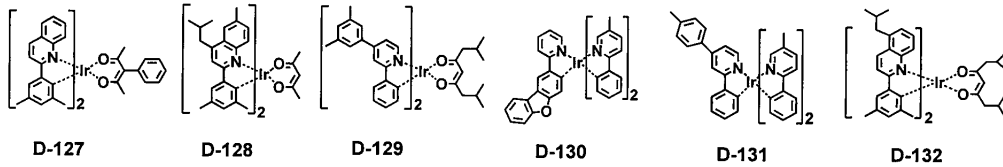
[0181]



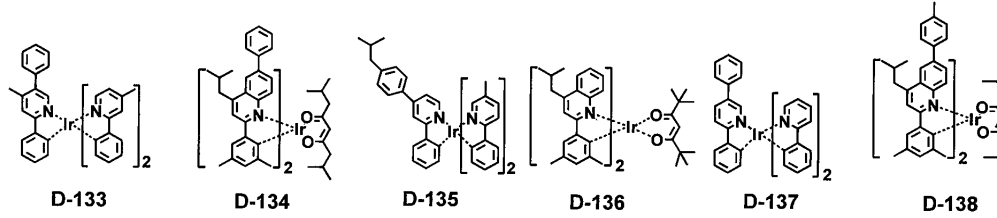
[0182]



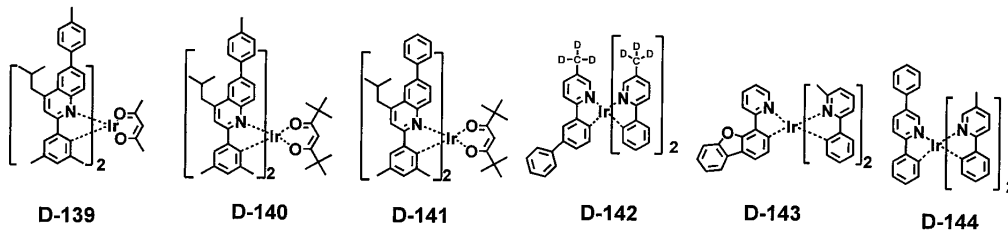
[0183]



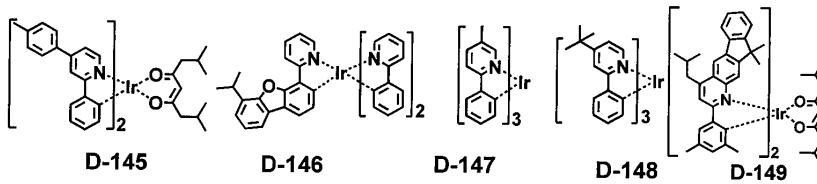
[0184]



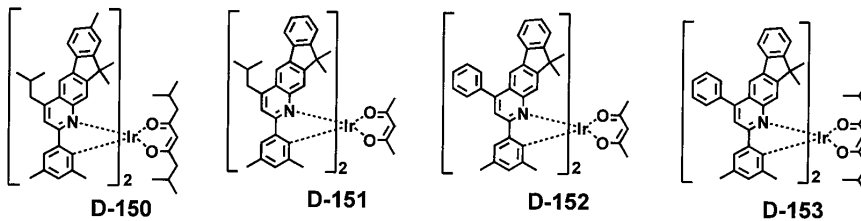
[0185]



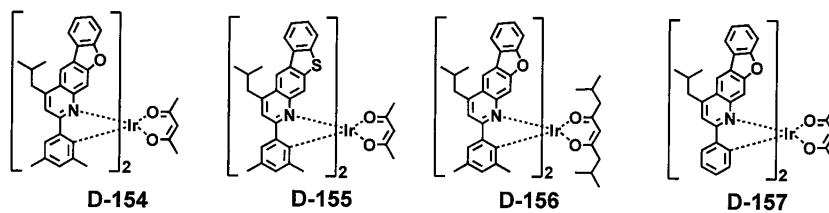
[0186]



[0187]



[0188]



[0189]

[0190] 본원의 유기 전계 발광 소자는 유기물층에 아릴아민계 화합물 및 스티릴아릴아민계 화합물로 이루어진 균으로부터 선택된 하나 이상의 화합물을 추가로 포함할 수도 있다.

[0191] 또한, 본원의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 유기물층은 1족, 2족, 4주기 전이금속, 5주기 전이금속, 란타넘계열 금속 및 d-전이 원소의 유기금속으로 이루어진 균으로부터 선택되는 하나 이상의 금속, 또는 이러한 금속을 포함하는 하나 이상의 착체 화합물을 추가로 포함할 수도 있다.

[0192] 본원의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 한 쌍의 전극의 적어도 한쪽의 내측표면에, 칼코제나이드(chalcogenid e)층, 할로젠화 금속층 및 금속 산화물층으로부터 선택되는 하나 이상의 층(이하, 이들을 "표면층"이라고 지칭 함)을 배치하는 것이 바람직하다. 구체적으로는, 발광 매체층 측의 양극 표면에 규소 및 알루미늄의 칼코제나이드(산화물을 포함한다)층을, 또한 발광 매체층 측의 음극 표면에 할로젠화 금속층 또는 금속 산화물층을 배치하는 것이 바람직하다. 상기 표면층에 의해 유기 전계 발광 소자의 구동 안정화를 얻을 수 있다. 상기 칼코제나이드

드의 바람직한 예로는  $\text{SiO}_x(1 \leq x \leq 2)$ ,  $\text{AlO}_x(1 \leq x \leq 1.5)$ ,  $\text{SiON}$ ,  $\text{SiAlON}$  등이 있고, 할로겐화 금속의 바람직한 예로는  $\text{LiF}$ ,  $\text{MgF}_2$ ,  $\text{CaF}_2$ , 불화 희토류 금속 등이 있으며, 금속 산화물의 바람직한 예로는  $\text{Cs}_2\text{O}$ ,  $\text{Li}_2\text{O}$ ,  $\text{MgO}$ ,  $\text{SrO}$ ,  $\text{BaO}$ ,  $\text{CaO}$  등이 있다.

[0193] 양극과 발광층 사이에 정공 주입층, 정공 전달층, 정공 보조층, 발광 보조층 또는 전자 차단층, 또는 이들의 조합이 사용될 수 있다. 정공 주입층은 양극에서 정공 전달층 또는 전자 차단층으로의 정공 주입 장벽(또는 정공 주입 전압)을 낮출 목적으로 복수의 층이 사용될 수 있으며, 각 층은 2개의 화합물이 동시에 사용될 수 있다. 정공 전달층 또는 전자 차단층도 복수의 층이 사용될 수 있다.

[0194] 발광층과 음극 사이에 전자 버퍼층, 정공 차단층, 전자 전달층 또는 전자 주입층, 또는 이들의 조합이 사용될 수 있다. 전자 버퍼층은 전자 주입을 조절하고 발광층과 전자 주입층 사이의 계면 특성을 향상시킬 목적으로 복수의 층이 사용될 수 있으며, 각 층은 2개의 화합물이 동시에 사용될 수 있다. 정공 차단층 또는 전자 전달층도 복수의 층이 사용될 수 있고, 각 층에 복수의 화합물이 사용될 수 있다.

[0195] 또한, 본원의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 한 쌍의 전극의 적어도 한쪽의 표면에 전자 전달 화합물과 환원성 도판트의 혼합 영역, 또는 정공 전달 화합물과 산화성 도판트의 혼합 영역을 배치하는 것도 바람직하다. 이러한 방식에 의해 전자 전달 화합물이 음이온으로 환원되므로 혼합 영역으로부터 발광 매체에 전자를 주입 및 전달하기 용이해진다. 또한, 정공 전달 화합물은 산화되어 양이온으로 되므로 혼합 영역으로부터 발광 매체에 정공을 주입 및 전달하기 용이해진다. 바람직한 산화성 도판트로서는 각종 루이스산 및 억셉터(acceptor) 화합물을 들 수 있고, 바람직한 환원성 도판트로서는 알칼리 금속, 알칼리 금속 화합물, 알칼리 토류 금속, 희토류 금속 및 이들의 혼합물을 들 수 있다. 또한 환원성 도판트층을 전하 생성층으로 사용하여 2개 이상의 발광층을 가진, 백색 발광을 하는 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있다.

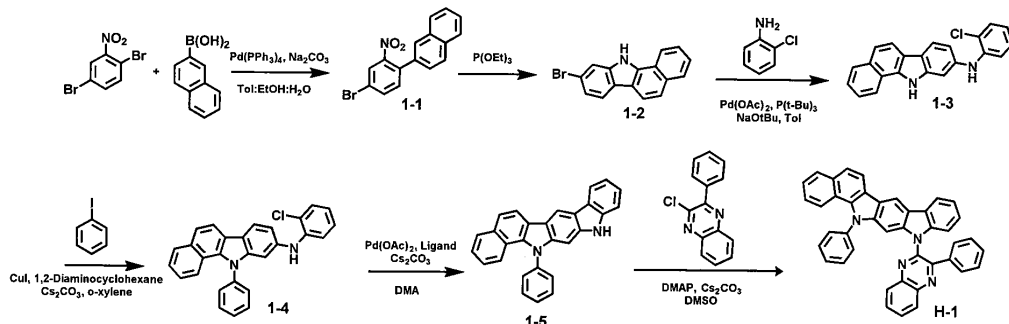
[0196] 본원의 유기 전계 발광 소자의 각층의 형성은 진공 증착, 스퍼터링, 플라즈마, 이온 플레이팅 등의 건식 성막법이나, 스핀 코팅, 침지 코팅(dip coating), 플로우 코팅 등의 습식 성막법 중 어느 하나의 방법을 적용할 수 있다. 본원의 제1 호스트 화합물과 제2 호스트 화합물을 성막할 때, 공증착 또는 혼합증착으로 공정한다.

[0197] 습식 성막법의 경우, 각 층을 형성하는 재료를 에탄올, 클로로포름, 테트라하이드로퓨란, 디옥산 등의 적절한 용매에 용해 또는 분산시켜 박막을 형성하는데, 그 용매는 각 층을 형성하는 재료가 용해 또는 분산될 수 있고, 성막성에 문제가 없는 것이라면 어느 것이어도 된다.

[0198] 또한, 본원의 유기 전계 발광 소자를 이용하여 디스플레이 장치, 예를 들면, 스마트폰, 태블릿, 노트북, PC, TV 또는 차량용의 디스플레이 장치, 또는 조명 장치, 예를 들면, 옥외 또는 옥내용 조명 장치를 제조하는 것이 가능하다.

[0199] 이하에서, 본원의 상세한 이해를 위하여 본원의 대표 화합물을 들어 본원에 따른 화합물의 제조방법 및 이의 물성을 나타내었다. 그러나, 본 발명은 하기의 예들에 한정되는 것은 아니다.

[0200] [실시예 1] 화합물 H-1의 제조



[0201]

[0202] 화합물 1-1의 제조

[0203] 2,5-디브로모니트로벤젠 (80g, 465mmol), 2-나프틸보론산 (170g, 604mmol), 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐 ( $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ ) (16.2g, 13.95mmol), 및 탄산나트륨 ( $\text{Na}_2\text{CO}_3$ ) (123g, 1163mmol)에 톨루엔 (1000mL), 에탄올 (EtOH) (160mL), 및 정제수 (500mL) 을 투입한 후, 하룻동안 환류 교반 하였다. 반응 종결 후 실온으로 냉각한

뒤 증류수와 에틸아세테이트(EA)로 추출하였다. 유기층을 감압 증류한 후 MC/Hex으로 컬럼크로마토그래피로 분리하여 화합물 **1-1** (88g, 58 %)를 얻었다.

[0204] 화합물 1-2의 제조

[0205] 화합물 **1-1** (88g, 268mmol)에 트리에틸포스파이트(P(OEt)<sub>3</sub>) (1.3L)을 투입한 후, 150℃에서 하룻동안 교반하였다. 반응 종결 후 감압 농축 후 메틸렌클로라이드(MC)로 추출한 후 유기층을 농축하였다. MC/Hex으로 컬럼크로마토그래피로 분리하여 화합물 **1-2** (55g, 69%)를 얻었다.

[0206] 화합물 1-3의 제조

[0207] 화합물 **1-2** (40g, 135mmol), 클로로아닐린 (21mL, 202mmol), 아세트산팔라듐(Pd(OAc)<sub>2</sub>) (1.2g, 5.4mmol), 트리-tert-부틸포스핀(P(t-Bu)<sub>3</sub>) (50%) (5.4mL, 10.8mmol), 및 나트륨 tert-부톡사이드(NaOt-Bu) (32.5g, 338mmol)을 톨루엔 (390mL)에 투입한 후, 하룻동안 환류 교반하였다. 반응 종결 후 실온으로 냉각한 뒤, 증류수와 MC로 추출하였다. 유기층을 감압 증류한 후 MC/Hex으로 컬럼크로마토그래피로 분리하여 화합물 **1-3** (22g, 48%)를 얻었다.

[0208] 화합물 1-4의 제조

[0209] 화합물 **1-3** (22g, 64.2mmol), 아이오도벤젠 (13mL, 115.5mmol), 요오드화구리(CuI) (6.1g, 32mmol), 1,2-디아미노사이클로헥산 (7.7mL, 64.17mmol), 및 세슘 카보네이트(Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>) (41.8g, 128.3mmol)을 o-자일렌 (350mL)에 투입한 후, 하룻동안 환류 교반하였다. MC로 추출 후 감압 증류한 후 MC/Hex으로 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 **1-4** (16g, 58%)를 얻었다.

[0210] 화합물 1-5의 제조

[0211] 화합물 **1-4** (15.4g, 36.76mmol), Pd(OAc)<sub>2</sub> (0.83g, 3.7mmol), 트리사이클로헥실포스포늄 테트라플루오로보레이트(C<sub>18</sub>H<sub>34</sub>P·BF<sub>4</sub>) (2.7g, 7.35mmol), 및 Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (36g, 110.2mmol)에 디메틸아세트아미드(DMA) (150mL)을 넣은 후 180℃에서 하룻동안 교반하였다. 반응 종결 후 에틸아세테이트를 사용하여 추출한 뒤 유기층을 황산마그네슘(MgSO<sub>4</sub>)으로 건조하고, 거른 후 감압 하에서 용매를 제거한 후, 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 **1-5** (10.5g, 75%)을 얻었다.

[0212] 화합물 H-1의 제조

[0213] 화합물 **1-5** (30.0g, 78.4mmol), 2-클로로-3-페닐퀴녹살린 (23.0g, 94.1mmol), 4-디메틸아미노피리딘 (4.8g, 39.2mmol), 및 Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (25.5g, 78.4mmol)을 디메틸설폭사이드(DMSO) 392mL에 녹이고, 135℃에서 4시간 동안 교반하고, 증류수를 넣었다. 생성된 고체를 감압 여과하였다. 고체를 MC에 녹여 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 **H-1** (11.7g, 19.94mmol, 25%)을 얻었다.

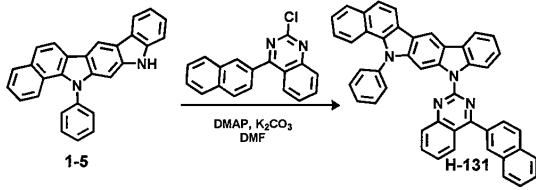
<sup>1</sup>H NMR (600MHz,CDCl<sub>3</sub>,δ) 8.767(s,1H), 8.316-8.302(d,1H), 8.273-8.242(t,2H), 8.139-8.123(d,1H), 7.976-7.962(d,1H), 7.860-7.810(m,2H), 7.743-7.729(d,1H), 7.691-7.667(t,1H), 7.604-7.550(m,3H), 7.383-7.380(d,1H), 7.375-7.360(m,3H), 7.321-7.301(m,3H), 7.278-7.264(d,1H), 7.179-7.154(t,1H), 7.099-7.078(t,1H), 7.055-7.031(t,2H), 6.632(s,1H)

[0214]

	MW	UV	PL	M.P.
<b>H-1</b>	<b>586.68</b>	<b>280 nm</b>	<b>594 nm</b>	<b>312~356 °C</b>

[0215]

[0216] [실시예 2] 화합물 H-131의 제조



[0217]

[0218] 화합물 1-5 (3.5g, 9.15mmol), 2-클로로-4-(나프탈렌-2-일)퀴나졸린 (3.2g, 10.98mmol), 4-디메틸아미노피리딘 (DMAP) (0.6g, 4.58mmol), 및 K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (3.2g, 22.88mmol)을 N,N-디메틸포름아미드(DMF) 46mL에 녹이고, 120℃에서 3시간 동안 교반하고, 증류수를 넣었다. 생성된 고체를 감압 여과하였다. 고체를 MC에 녹여 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 H-131(3.47g, 5.45mmol, 60%)을 얻었다.

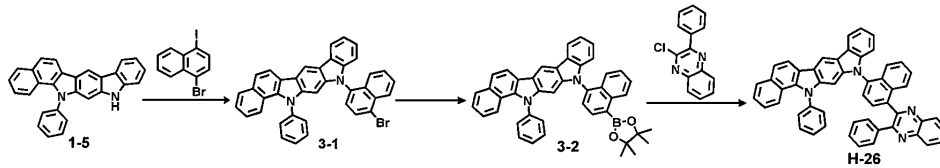
[0219]

<sup>1</sup>H NMR (600MHz,CDCl<sub>3</sub>,δ) 9.086-9.072(d,1H), 8.878(s,1H), 8.811(s,1H), 8.373-8.359(d,1H), 8.309(s,1H), 8.254-8.243(d,1H), 8.160-8.147(d,1H), 8.074-8.060(d,2H), 8.010-7.960(m,3H), 7.907-7.879(m,2H), 7.768-7.754(d,1H), 7.712-7.687(t,1H), 7.665-7.651(t,1H), 7.518-7.479(m,4H), 7.433-7.379(m,3H), 7.272-7.247(m,2H), 7.205-7.166(m,2H)

	MW	UV	PL	M.P.
H-131	636.74	344 nm	607 nm	318 °C

[0220]

[0221] [실시예 3] 화합물 H-26의 제조



[0222]

[0223] 화합물 3-1의 제조

[0224] 화합물 1-5 (40 g, 101.4 mmol), 1-브로모-4-아이오도나프탈렌 (87 g, 26.1 mmol), CuSO<sub>4</sub> (367 mg, 3.01 mmol), 및 K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (28 g, 202.8 mmol)을 디클로로벤젠 500mL에 녹이고, 200℃에서 12시간 동안 교반하였다. 반응이 끝나면 반응 용매를 증류로 제거한 뒤, 건조시키고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 3-1 18 g (수율: 30%)을 얻었다.

[0225] 화합물 3-2의 제조

[0226] 화합물 3-1 (18 g, 30.6 mmol), 비스(피나콜라토)디보론 (9.3 g, 36.6 mmol), PdCl<sub>2</sub>(PPh<sub>3</sub>)<sub>2</sub> (2.1 g, 3.06 mmol), 및 KOAc (6 g, 61.2 mmol)을 1,4-디옥산 150 mL에 녹이고, 120℃에서 12시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤 건조시키고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 3-2 11 g (수율: 56.6%)을 얻었다.

[0227] 화합물 H-26의 제조

[0228] 화합물 3-2 (5.6 g, 8.8 mmol), 2-클로로-3-페닐퀴놀살린 (2.5 g, 10.6 mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (3.6 g, 26.4 mmol), 및 Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (0.5 g, 0.44 mmol)을 H<sub>2</sub>O 25 mL, 톨루엔 50 mL, 및 에탄올 25 mL에 녹이고, 120℃에서 3시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤 건조시키고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 H-26 1.3 g (수율: 20.7%)를 얻었다.

<sup>1</sup>H NMR (600MHz,CDCl<sub>3</sub>,δ) 8.95 (s,1H), 8.40-8.26(m, 4H), 7.98-7.76(m, 5H), 7.59-7.53(m,5H) 7.43-7.07(m,17 H)

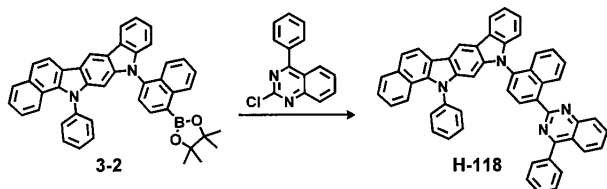
[0229]

	MW	UV	PL	M.P.
H-26	712.86	342nm	604nm	198℃

[0230]

[0231]

[실시예 4] 화합물 H-118의 제조



[0232]

[0233]

플라스크에 화합물 3-2 (6 g, 9.4 mmol), 2-클로로-4-페닐퀴나졸린 (2.73 g, 11.3 mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (3.9 g, 28.2 mmol), 및 Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (0.54 g, 0.47 mmol)을 H<sub>2</sub>O 25mL, 톨루엔 50mL, 및 에탄올 25 mL에 녹이고, 120℃에서 3시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면 에틸아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤 건조시키고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 H-118 1.7 g (수율: 25%)를 얻었다.

<sup>1</sup>H NMR (600MHz,CDCl<sub>3</sub>,δ) 8.95 (s,1H), 8.78-8.76(d, J = 12 Hz, 1H) , 8.39-8.23(m, 5H), 8.00-7.90(m, 4H), 7.76-.46(m, 8H) 7.43~7.28(m, 11H), 6.91-6.90(d, J = 6.0 Hz, 1H),6.72(s, 1H)

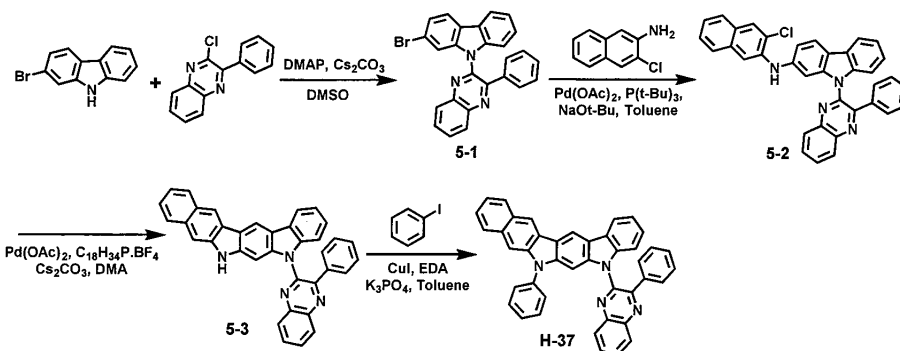
[0234]

	MW	UV	PL	M.P.
H-118	712.86	338nm	556nm	162℃

[0235]

[0236]

[실시예 5] 화합물 H-37의 제조



[0237]

[0238]

화합물 5-1의 제조

[0239]

2-브로모-9H-카바졸 (25.0g, 102mmol), 2-클로로-3-페닐퀴놀린 (29.4g, 122mmol), 4-디메틸아미노피리딘 (6.3g, 51mmol), 및 Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (33.0g, 102mmol)을 디메틸설폭사이드(DMSO) 510mL에 녹이고, 110℃에서 2시간 동안 교반한 후, 증류수를 넣었다. 생성된 고체를 감압 여과하였다. 고체를 MC에 녹여 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 5-1 (30.0g, 66%)을 얻었다

[0240]

화합물 5-2의 제조

[0241]

화합물 5-1 (14.4g, 32mmol), 3-클로로나프탈렌-2-아민 (6.8g, 38.3mmol), Pd(OAc)<sub>2</sub> (0.36g, 1.6mmol), P(t-Bu)<sub>3</sub>(50%) (1.6mL, 3.2mmol), 및 NaOt-Bu (7.7g, 80mmol)을 톨루엔 90mL에 투입한 후, 6시간 동안 환류 교반하였다. 반응 종결 후 실온으로 냉각 한 뒤 증류수와 MC로 추출하였다. 유기층을 감압증류한 후, MC/Hex으로 컬럼

크로마토그래피로 분리하여 화합물 5-2 (13.5g, 77%)를 얻었다.

[0242] 화합물 5-3의 제조

[0243] 화합물 5-2 (12.5g, 22.9mmol), Pd(OAc)<sub>2</sub> (0.51g, 2.3mmol), C<sub>18</sub>H<sub>34</sub>P·BF<sub>4</sub> (1.7g, 4.6mol), 및 Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (18.6g, 58mmol)에 디메틸아세트아미드(DMA) 92mL을 넣은 후, 195℃에서 하룻동안 교반하였다. 반응 종결 후 에틸아세테이트를 사용하여 추출 한 뒤 유기층을 황산마그네슘(MgSO<sub>4</sub>)으로 건조하고 거른 후 감압 하에서 용매를 제거한다. 생성된 고체를 MC에 녹인 후 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 5-3 (6.6g, 56%)을 얻었다.

[0244] 화합물 H-37의 제조

[0245] 화합물 5-3 (6.6g, 12.9mmol), 아이오도벤젠 (2.9mL, 25.9mmol), CuI (1.3g, 6.45mmol), 에틸렌디아민 (0.9mL, 12.9mmol), 및 K<sub>3</sub>PO<sub>4</sub> (6.9g, 32.3mmol)을 톨루엔 70mL에 투입한 후, 6시간 동안 환류교반하였다. MC로 추출한 뒤 감압증류한 후 MC/Hex으로 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 H-37 (16g, 58%)를 얻었다.

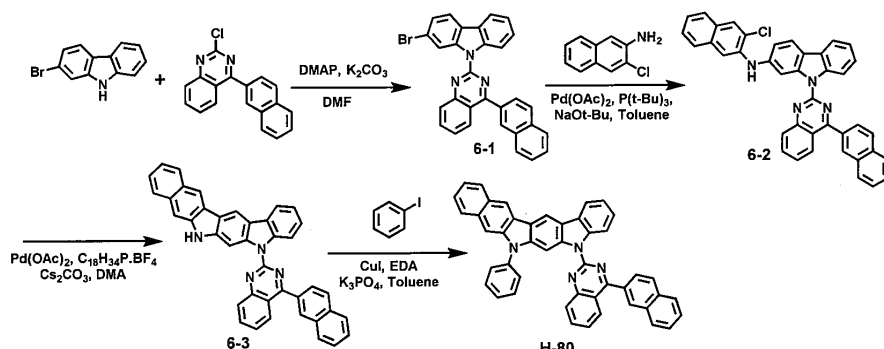
<sup>1</sup>H NMR (600MHz,CDCl<sub>3</sub>,δ) 8.84(s,1H), 8.63(s,1H), 8.27-8.26(d,1H), 8.23-8.21(m,1H), 8.13-8.12(d,1H), 8.07-8.06(d,1H), 7.86-7.80(m,3H), 7.63-7.60(t,2H), 7.58(s,1H), 7.50-7.35(m,10H), 7.16-7.10(m,3H), 6.84(s,1H)

[0246]

	MW	M.P.
H-37	586.7	247 °C

[0247]

[0248] [실시예 6] 화합물 H-80의 제조



[0249]

[0250] 화합물 6-1의 제조

[0251] 2-브로모-9H-카바졸 (15.0g, 61mmol), 2-클로로-4-(나프탈렌-2-일)퀴나졸린 (21.2g, 73mmol), 4-디메틸아미노피리딘 (3.8g, 31mmol), 및 K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (40g, 122mmol)을 DMF 300mL에 녹이고 120℃에서 3시간 동안 교반하고, 증류수를 넣었다. 생성된 고체를 감압 여과하였다. 고체를 MC에 녹여 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 6-1(10.3g, 34%)을 얻었다

[0252] 화합물 6-2의 제조

[0253] 화합물 6-1 (10.3g, 20.5mmol), 3-클로로나프탈렌-2-아민 (4.38g, 24.7mmol), Pd(OAc)<sub>2</sub> (0.24g, 1.0mmol), P(t-Bu)<sub>3</sub>(50%) (1.0mL, 2.1mmol), 및 NaOt-Bu (4.93g, 51.3mmol)을 톨루엔 70mL에 투입한 후 6시간 동안 환류 교반 하였다. 반응 종결 후 실온으로 냉각 한 뒤 증류수와 MC로 추출하였다. 유기층을 감압증류한 후 MC/Hex으로 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 6-2 (9.7g, 78%)를 얻었다.

[0254] 화합물 6-3의 제조

[0255] 화합물 6-2 (9.7g, 16.2mmol), Pd(OAc)<sub>2</sub> (0.4g, 1.6mmol), C<sub>18</sub>H<sub>34</sub>P·BF<sub>4</sub> (1.2g, 3.2mol), 및 Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (13.0g, 40.4mmol)을 DMA 65mL에 넣은 후 195℃에서 하룻동안 교반하였다. 반응 종결 후 에틸아세테이트를 사용하여 추출 한 뒤, 유기층을 MgSO<sub>4</sub> 로 건조하고 거른 후 감압 하에서 용매를 제거하였다. 고체를 MC에 녹인 후 컬럼 크

로마토그래피로 분리하여 화합물 **6-3** (5.8g, 64%)을 얻었다.

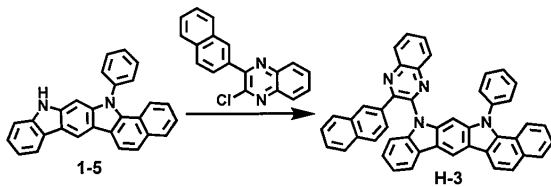
[0256] 화합물 H-80의 제조

[0257] 화합물 **6-3** (2.8g, 5.0mmol), 아이오도벤젠 (1.1mL, 10.0mmol), CuI (0.5g, 2.5mmol), 에틸렌디아민 (0.4mL, 5.0mmol), K<sub>3</sub>PO<sub>4</sub> (2.7g, 12.5mmol)을 톨루엔 25mL에 투입한 후, 6시간 동안 환류교반하였다. MC로 추출한 뒤, 감압증류한 후, MC/Hex으로 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 **H-80**(1.0g, 31%)를 얻었다.

[0258] <sup>1</sup>H NMR (600MHz,CDCl<sub>3</sub>,δ) 9.116(s,1H), 9.105-9.092(d,1H), 8.874(s,1H), 8.694(s,1H), 8.312(s,1H), 8.234-8.222(d,1H), 8.192-8.178(d,1H), 8.105-8.092(d,1H), 8.055-8.036(m,2H), 8.009-7.995(d,1H), 7.976-7.963(d,1H), 7.929-7.895(m,2H), 7.860-7.847(d,1H), 7.707(s,1H), 7.693-7.626(m,4H), 7.530-7.493(q,2H), 7.459-7.408(m,3H), 7.301-7.275(t,2H), 7.165-7.140(t,1H)

	MW	M.P.
<b>H-80</b>	<b>636.7</b>	<b>263 °C</b>

[0259] [실시예 7] 화합물 H-3의 제조

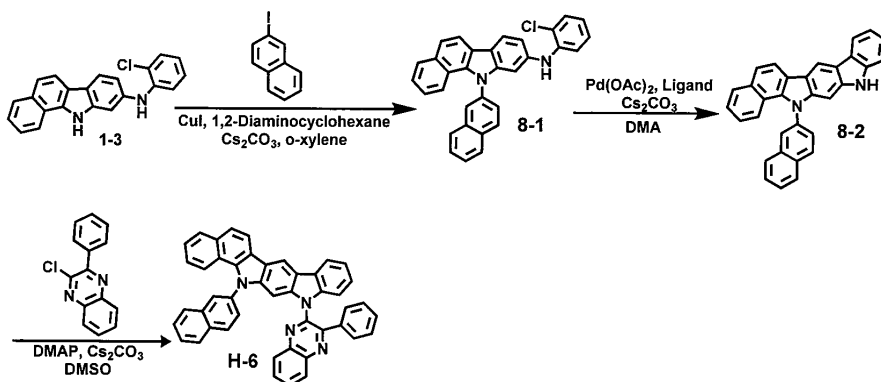


[0261] 화합물 **1-5** (5.5 g, 14 mmol), 2-클로로-3-(나프탈렌-2-일)퀴놀살린 (5.0 g, 17 mmol), Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (9.3 g, 29mmol), 및 DMAP (0.88 g, 7 mmol)을 DMSO 71 mL에 녹인 후, 100°C에서 18시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면 상온으로 냉각하고 증류수를 넣었다. MC로 추출하고 황산마그네슘으로 건조하였다. 감압 증류하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 **H-3** 3.4 g (37%)을 얻었다.

[0262] <sup>1</sup>H NMR (600MHz,CDCl<sub>3</sub>,δ) 8.75(s, 1H), 8.30(m, 1H),8.28-8.26(m, 2H), 8.15(m, 1H), 8.07(s, 1H), 7.93(d, J=8.18 Hz, 1H),7.85-7.82(m, 2H), 7.69 (d, J=8.41 Hz, 2H), 7.64-7.58 (m, 5H), 7.41-7.32 (m, 7H), 7.27-7.24 (m, 1H), 7.19 (d, J=8.57 Hz, 1H), 7.13-7.10 (m, 1H), 6.88 (d, J=6.83 Hz, 1H), 6.64 (s, 1H)

	MW	UV	PL	M.P.
<b>H-3</b>	<b>636.76</b>	<b>615nm</b>	<b>470nm</b>	<b>354°C</b>

[0263] [실시예 8] 화합물 H-6의 제조



[0267] 화합물 8-1의 제조

[0268] 화합물 **1-3** (19g, 55.42mmol), 2-아이오도나프탈렌 (21g, 83.13 mmol), 1,2-사이클로헥산-디아민 (6.6mL, 55.42 mmol), Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (36g, 110.84 mmol), 및 CuI (5.2g, 27.71 mmol)을 o-자일렌 280mL에 녹인 후, 150℃에서 5시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤 건조시키고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 **8-1** (17.7g, 77%)을 얻었다.

[0269] 화합물 8-2의 제조

[0270] 화합물 **8-1** (15.7g, 36.29mmol), Pd(OAc)<sub>2</sub> (1.6g, 7.259mmol), Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (35g, 108.8 mmol), 및 PCy<sub>3</sub>.HBF<sub>4</sub> (4g, 10.88mmol)을 DMA 300mL에 녹인 후, 150℃에서 5시간 동안 환류 시켰다. 반응이 끝나면 에틸아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤 건조시키고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 **8-2** (3.3g, 23%)을 얻었다.

[0271] 화합물 H-6의 제조

[0272] 화합물 **8-2** (3.3g, 7.63 mmol), 2-클로로-3-페닐퀴놀살린 (2.2g, 9.16 mmol), Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (2.4g, 7.63mmol), 및 DMAP (0.46g, 3.81 mmol)을 DMSO 40mL에 녹인 후, 135℃에서 6시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면 상온으로 냉각하고 증류수를 넣었다. MC로 추출하고 황산마그네슘으로 건조하였다. 감압 증류하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 **H-6** 2.3g(47%)을 얻었다.

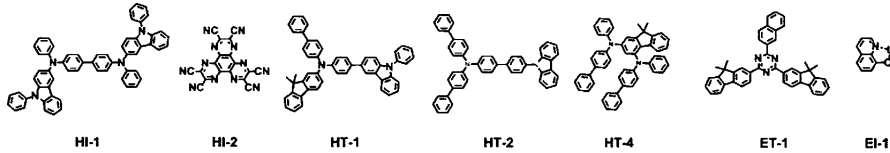
[0273] <sup>1</sup>H NMR (600MHz,CDCl<sub>3</sub>,δ) 8.78(s, 1H), 8.33-8.32(d, J=6.0 Hz, 1H),8.25-7.95(m, 7H), 7.81-7.77(m, 4H),7.76-7.54(m, 3H), 7.37-7.23(m, 6H), 7.07-6.64 (m, 5H)

	MW	UV	PL	M.P.
<b>H-6</b>	<b>636.76</b>	<b>354nm</b>	<b>530nm</b>	<b>188℃</b>

[0274] 이하에서, 본 발명의 상세한 이해를 위하여 본 발명의 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자의 발광 특성을 설명한다. 그러나, 이하의 실시예는 본원의 상세한 이해를 위하여 본원에 따른 OLED 소자의 특성을 설명한 것일 뿐, 본원은 하기의 예들에 한정되는 것은 아니다.

[0276] **[소자 제조에 1] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 호스트로 포함하는 OLED 소자 제조**

[0277] 본원의 유기 전계 발광 화합물을 포함하여 OLED 소자를 제조하였다. 우선, OLED용 글래스(지오마텍사 제조)로부터 얻어진 투명 전극 ITO 박막(10Ω/□)을, 트리클로로에틸렌, 아세톤, 에탄올 및 증류수를 순차적으로 사용하여 초음파 세척을 실시한 후, 이소프로판올에 넣어 보관한 후 사용하였다. 다음으로 진공 증착 장비의 기관 홀더에 ITO기관을 장착한 후, 진공 증착 장비 내의 셀에 제1 정공 주입층 물질 **HI-1**을 넣고 챔버 내의 진공도가 10<sup>-6</sup> torr에 도달할 때까지 배기시킨 후, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 ITO 기관 위에 80nm 두께의 제1 정공 주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 제2 정공 주입층 물질 **HI-2**을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제1 정공 주입층 위에 5nm 두께의 제2 정공 주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 제1 정공 전달층 물질 **HT-1**을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제2 정공 주입층 위에 10nm 두께의 제1 정공 전달층을 증착하였다. 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 제2 정공 전달층 물질 **HT-4**을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제1 정공 전달층 위에 60nm 두께의 제2 정공 전달층을 증착하였다. 정공 주입층과 정공 전달층을 형성시킨 후, 그 위에 발광층을 다음과 같이 증착시켰다. 진공 증착 장비 내의 셀에 호스트로서 화합물 **H-1**을 넣고, 또 다른 셀에는 도판트로서 화합물 **D-71**을 넣은 후, 호스트와 도판트의 합계량에 대해 도판트를 3중량%의 양으로 도핑함으로써 상기 제2 정공 전달층 위에 40nm 두께의 발광층을 증착하였다. 이어서, 또 다른 셀 두 군데에 화합물 **ET-1**과 화합물 **EI-1**를 동시에 증발시켜 발광층 위에 35nm 두께의 전자 전달층을 증착하였다. 이어서, 전자 주입층으로 화합물 **EI-1**를 상기 전자 전달층 위에 2nm 두께로 증착한 후, 다른 진공 증착 장비를 이용하여 Al 음극을 상기 전자 주입층 위에 80nm의 두께로 증착하여 OLED 소자를 제조하였다.

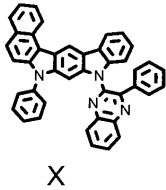


[0278]

[0279] 그 결과, 2.8V의 전압에서 28.11m/W의 전력 효율을 보이고, 1000cd/m<sup>2</sup>의 적색 발광이 확인되었다.

[0280] [비교예 1] 종래의 유기 전계 발광 화합물을 호스트로 포함하는 OLED 소자 제조

[0281] 호스트로서 하기 화합물 X를 사용한 것 외에는 소자 실시예 1과 동일한 방법으로 OLED소자를 제조하였다.



[0282]

[0283] 그 결과, 3.2V의 전압에서 26.01m/W의 전력 효율을 보이고, 1000cd/m<sup>2</sup>의 적색 발광이 확인되었다.

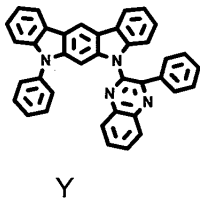
[0284] [소자 제조예 2] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 호스트로 포함하는 OLED 소자 제조

[0285] 제2 정공 전달층 물질로서 화합물 HT-2를 사용하고, 전자 전달층 물질로서 화합물 ET-1과 화합물 EI-1을 30nm 두께로 증착한 것 외에는 소자 제조예 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제조하였다.

[0286] 그 결과, 3.4V의 전압에서 23.51m/W의 전력 효율을 보이고, 1000cd/m<sup>2</sup>의 적색 발광이 확인되었다.

[0287] [비교예 2] 종래의 유기 전계 발광 화합물을 호스트로 포함하는 OLED 소자 제조

[0288] 호스트로서 하기 화합물 Y를 사용한 것 외에는 소자 제조예 2와 동일한 방법으로 OLED소자를 제조하였다.



[0289]

[0290] 그 결과, 3.9V의 전압에서 21.01m/W의 전력 효율을 보이고, 1000cd/m<sup>2</sup>의 적색 발광이 확인되었다.

[0291] [소자 제조예 3] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 호스트로 포함하는 OLED 소자 제조

[0292] 호스트로서 화합물 H-131를 사용한 것 외에는 소자 제조예 1과 동일한 방법으로 OLED소자를 제조하였다.

[0293] 그 결과, 2.9V의 전압에서 19.11m/W의 전력 효율을 보이고, 1000cd/m<sup>2</sup>의 적색 발광이 확인되었다.

[0294] [소자 제조예 4] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 호스트로 포함하는 OLED 소자 제조

[0295] 호스트로서 화합물 H-37를 사용한 것 외에는 소자 제조예 1과 동일한 방법으로 OLED소자를 제조하였다.

[0296] 그 결과, 3.1V의 전압에서 23.31m/W의 전력 효율을 보이고, 1000cd/m<sup>2</sup>의 적색 발광이 확인되었다.

[0297] [소자 제조예 5] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 호스트로 포함하는 OLED 소자 제조

[0298] 호스트로서 화합물 H-6를 사용한 것 외에는 소자 제조예 1과 동일한 방법으로 OLED소자를 제조하였다.

[0299] 그 결과, 2.9V의 전압에서 28.21m/W의 전력 효율을 보이고, 1000cd/m<sup>2</sup>의 적색 발광이 확인되었다.

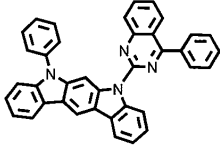
[0300] [소자 제조예 6] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 호스트로 포함하는 OLED 소자 제조

[0301] 호스트로서 화합물 H-3를 사용한 것 외에는 소자 제조에 1과 동일한 방법으로 OLED소자를 제조하였다.

[0302] 그 결과, 2.9V의 전압에서 28.6lm/W의 전력 효율을 보이고, 1000cd/m<sup>2</sup>의 적색 발광이 확인되었다.

[0303] [비교예 3] 종래의 유기 전계 발광 화합물을 호스트로 포함하는 OLED 소자 제조

[0304] 호스트로서 하기 화합물 Z를 사용한 것 외에는 소자 제조에 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제조하였다.



Z

[0305]

[0306] 그 결과, 3.4V의 전압에서 18.9lm/W의 전력 효율을 보이고, 1000cd/m<sup>2</sup>의 적색 발광이 확인되었다.

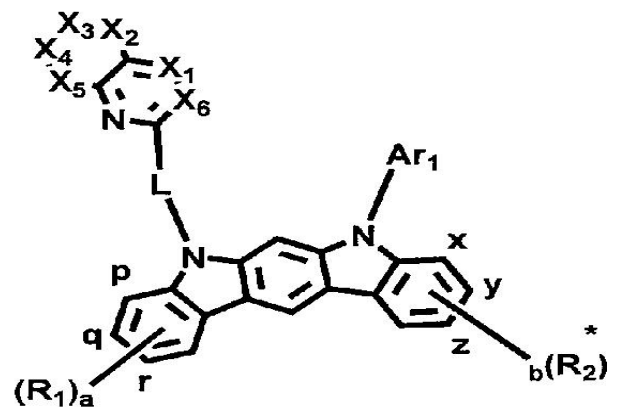
[0307] 위의 소자 제조에 1 내지 6과 비교예 1 내지 3에서 볼 수 있듯이, 본원에 따른 유기 전계 발광 화합물을 호스트로 포함하는 유기 전계 발광 소자는 종래의 유기 전계 발광 화합물을 사용한 유기 전계 발광 소자보다 낮은 구동 전압 특성, 및 높은 전력 효율 특성을 가진다. 이는, 본 발명에 따른 화합물의 높은 HOMO와 정공 전달층(HTL)의 HOMO가 향상된 조화(harmonization)에 의해 정공 주입을 가능하게 하기 때문인 것으로 이해되며, 이로 인해 정공 이동도가 증가하고, 이러한 정공 이동도의 증가는 낮은 구동 전압을 초래하는 것으로 이해된다.

[0308] 따라서, 본원에 따른 유기 전계 발광 화합물을 사용하면 같은 휘도의 빛을 내기 위해 사용되는 전압이 낮으므로, 소비 전력을 낮출 수 있는 장점을 가질 수 있음을 확인할 수 있다. 나아가, 현재 OLED 패널이 주로 사용되고 있는 휴대용 디스플레이 기기에 있어 배터리 사용 시간을 늘릴 수 있는 이점을 가질 수 있음을 확인할 수 있다.

专利名称(译)	有机电致发光化合物和含有它的有机电致发光器件		
公开(公告)号	<a href="#">KR1020180037881A</a>	公开(公告)日	2018-04-13
申请号	KR1020170098913	申请日	2017-08-04
[标]申请(专利权)人(译)	罗门哈斯电子材料有限公司		
申请(专利权)人(译)	룸엔드하스전자재료코리아유한회사		
[标]发明人	LEE SU HYUN 이수현 KIM CHI SIK 김치식 KANG HEE RYONG 강희룡 KIM BITNARI 김빛나리		
发明人	이수현 김치식 강희룡 김빛나리		
IPC分类号	C09K11/06 C07D403/04 C07D487/04 H01L51/00 H01L51/50		
代理人(译)	张本勋		
优先权	1020160128230 2016-10-05 KR		
外部链接	<a href="#">Espacenet</a>		

摘要(译)

本发明涉及有机电致发光化合物和包含该有机电致发光化合物的有机电致发光器件，并且通过包含根据本发明的有机电致发光化合物，可以提供具有低驱动电压和/或高功率效率特性的有机电致发光器件。



[화학식 1-a]